

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

**RESOLUCION DE PROBLEMAS DE INGENIERIA
QUIMICA MEDIANTE COMPUTADORA**

T E S I S
Que para Obtener el Título de:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A N :
JORGE LIONS QUINTERO
RAFAEL ISASSI OROZCO

MEXICO, D. F.

1978



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

CLAS TESIS 1978
ABO U.T. ~~203~~ y. 2.
FECHA ~~2/17/78~~
PROC ~~11/13/78~~
3 ~~11/13/78~~



JURADO ASIGNADO ORIGINALMENTE SEGUN EL TEMA:

PRESIDENTE	:	ING. ROBERTO ANDRADE CRUZ
VOCAL	:	ING. ENRIQUE BRAVO MEDINA
SECRETARIO	:	ING. ALFONSO MONDRAGON MEDINA
1er. SUPLENTE	:	ING. ARIEL BAUTISTA SALGADO
2do. SUPLENTE	:	ING. RAFAEL GARCIA NAVA

SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA:

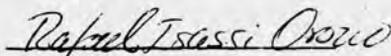
INSTITUTO MEXICANO DEL PETROLEO

NOMBRE COMPLETO Y FIRMA DE LOS SUSTENTANTES:

JORGE LIONS QUINTERO

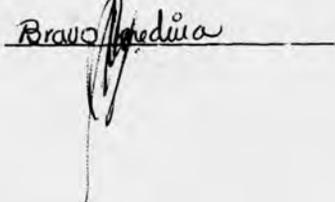


RAFAEL ISASSI OROZCO



NOMBRE COMPLETO Y FIRMA DEL ASESOR DEL TEMA:

ENRIQUE BRAVO MEDINA



A MIS PADRES :

JORGE A. LIONS

EMMA QUINTERO DE LIONS

SIN UN POCO DE TODO LO QUE ELLOS SON,
NUNCA HUBIERA SIDO POSIBLE.

GRACIAS

A MIS HERMANOS :

JULIO

ENRIQUE

PAUL

POR SU GRAN COMPAÑERISMO.

GRACIAS

CON MI AGRADECIMIENTO A :

ING. ALFONSO MONDRAGON MEDINA

ING. ARIEL BAUTISTA SALGADO

ING. RAFAEL GARCIA NAVA

POR SU GRAN AYUDA A :

ING. ROBERTO ANDRADE CRUZ

ING. ENRIQUE BRAVO MEDINA

A TODOS MIS MAESTROS

AL INSTITUTO MEXICANO DEL PETROLEO
SUBDIRECCION DE INGENIERIA DE PROYECTOS

GRACIAS

I N D I C E

INTRODUCCION		17
I	COMPUTACION	25
	Resumen sobre el lenguaje FORTRAN.	
PRIMERA SECCION		97
II	SUBROUTINA BWRS	103
	Cálculo de densidad, desviación isoté <u>r</u> mica de entalpia y desviación isoté <u>r</u> mica de entropia.	
III	SUBROUTINA VISC	127
	Cálculo de viscosidad.	
IV	SUBROUTINA CPENID	155
	Cálculo de capacidad calorífica y ental <u>p</u> pia ideal.	
V	SUBROUTINA EQUIL	169
	Cálculo de constantes de equilibrio.	
VI	SUBROUTINA CONDUCT	183
	Cálculo de conductividades té <u>r</u> micas.	
VII	SUBROUTINA ECVAP	205
	Cálculo de presiones de vapor y calo <u>r</u> res latentes de vaporización.	
VIII	SUBROUTINA TENSUP	225
	Cálculo de tensión superficial.	

IX	PROGRAMA TERMOPROPS	239
	Predicción de propiedades y equilibrio líquido - vapor.	
X	PROGRAMA PSICRO	279
	Cálculo de la carta de humedad.	
SEGUNDA SECCION		
XI	PROGRAMA DELTAP	299
	Cálculo de caída de presión en tuberías para flujo en una fase.	
XII	PROGRAMA DOSFASES	343
	Cálculo de caída de presión en tuberías para flujo en dos fases.	
XIII	PROGRAMA COMPRESOR	381
	Diseño y simulación de compresores centrifugos.	
XIV	PROGRAMA CAMCAL	405
	Diseño y simulación de cambiadores de calor de tubos y coraza.	
XV	PROGRAMA MATRIX	467
	Simulación de torres de destilación por el método de la matriz tridiagonal.	
XVI	PROGRAMA TFLASH	517
	Diseño de tanques separadores.	

TERCERA SECCION

XVII	SUBROUTINA INTEGFD	531
	Aplicación de la regla de Simpson.	
XVIII	SUBROUTINA REGULA	547
	Solución de ecuaciones por el método de Regula-Falsi.	
XIX	SUBROUTINA NEWTON	565
	Solución de ecuaciones por el método de Newton-Raphson.	
XX	SUBROUTINA INVERS	577
	Inversión y multiplicación de matrices.	
XXI	PROGRAMA AJUSTE	595
	Correlación de curvas por <u>m</u> ínimos <u>cu</u> adrados.	
XXII	SUBROUTINA INTERP	623
	Interpolación polinomial.	
XXIII	SUBROUTINA MULLER	635
	Solución de ecuaciones por el método de Muller.	
XXIV	SUBROUTINA RUNGE4	651
	Solución de ecuaciones diferenciales.	
	BIBLIOGRAFIA POR CAPITULOS	677
	CONCLUSION	691

INTRODUCCION

I N T R O D U C C I O N

La Ingeniería Química debe entenderse como una materia cuyos fines principales son: primero llegar a un conocimiento tan profundo de los compuestos que se encuentran en un estado natural, que se pueda idear una manera de transformarlos, para obtener productos finales de utilidad para la humanidad y segundo, diseñar el equipo necesario establecido a partir de la idea anterior.

La naturaleza es muy compleja y predecir su comportamiento de una manera precisa, ha obligado durante años a gran número de investigadores a un trabajo profundo y aún así, a la fecha, muchas de sus propiedades no se pueden evaluar sin errores considerables. A lo largo de los años, las ecuaciones que se han establecido, han sido cada vez más complicadas y difíciles de resolver, involucrando un mayor número de constantes y parámetros. Por la misma razón y con el fin de obtener siempre mejores productos, los métodos de diseño de los diferentes equipos también han ido aumentando en dificultades.

De lo que se acaba de decir, se deduce que un ingeniero químico debe tener las herramientas necesarias, no sólo para plantear sus ecuaciones, sino también y sobre todo, para poder llegar a la solución. Estas herramientas son básicamente las matemáticas, mediante las que puede lograr un planteamiento razonado, permitiéndole tener un panorama mucho más amplio y racional de sus problemas y los mé

todos numéricos, a su vez, basados en modelos matemáticos, mediante los cuales puede llegar a su solución de un modo rápido y preciso.

Sin embargo, una vez que se han establecido las ecuaciones y los métodos necesarios, la dificultad para resolverlos requiere de algoritmos matemáticos y métodos numéricos que no son fáciles de aplicar, ya que en su gran mayoría son iterativos y aunque precisos, requieren de un gran número de evaluaciones. Por lo tanto, es preciso contar con instrumentos que puedan hacer un gran número de cálculos rápidamente para así, llegar a la exactitud deseada; estos instrumentos son actualmente las computadoras y las calculadoras programables.

El empleo de una computadora exige el conocimiento de un lenguaje para programarla y se puede decir entonces, que el ingeniero químico debe dominar alguno, de preferencia científico.

Los fines que se persiguen con este trabajo, son dar las bases indispensables para el manejo del FORTRAN y demostrar el empleo de una computadora, para implementar los métodos numéricos necesarios, calcular con el menor error posible las propiedades físicas de los diferentes compuestos y finalmente, resolver de una manera eficiente los problemas involucrados en el cálculo de varios equipos.

Los programas y subrutinas que se presentan aquí, son de utilidad tanto para el estudiante como para el profesionalista en Ingeniería Química y se espera lograr que esta tesis impulse a ambos, principalmente

a los estudiantes, a redoblar sus esfuerzos para dominar el empleo de la computadora, debido a su importancia en esta difícil pero preciosa materia.

Para cada uno de los problemas que se presentan aquí, se da el planteamiento y la solución más adecuados de acuerdo con los diferentes investigadores y se complementan con los métodos numéricos necesarios para resolverlos.

En el primer capítulo de esta tesis, se dan las bases para el empleo del FORTRAN, que constituye el lenguaje en el que están hechos todos los programas y subrutinas, siendo el objetivo de este capítulo proveer una consulta rápida en caso de que no se entienda perfectamente alguna instrucción, sin que para ello se necesite de un manual del lenguaje, que en su mayoría son bastante grandes y están escritos con una nomenclatura difícil de entender.

El resto de la tesis se divide en tres secciones :

En la primera Sección se tratan las propiedades físicas básicas para predecir de una manera precisa el comportamiento de los diferentes compuestos y se subdivide en nueve capítulos. Del primero al séptimo (Capítulo II al VIII), se analiza una propiedad física diferente y se presenta una subrutina para calcularla en las dos fases líquida y gaseosa, para un compuesto puro o una mezcla, siendo las propiedades que se calculan las siguientes :

Densidad, desviación de entalpia y de entropia, viscosidad, capacidad calorífica, constantes de equilibrio líquido-vapor, conductividad térmica, presión de vapor, calor latente de vaporización y tensión superficial. Las subrutinas que calculan estas propiedades pueden emplearse con cualquier programa principal.

En el octavo capítulo (Capítulo IX) se presenta un programa que ensambla las subrutinas anteriores. Este programa permite el cálculo de las propiedades mencionadas arriba y puede hacer un cálculo "FLASH" en el caso de que se tengan dos fases (líquido y vapor) en equilibrio.

El último capítulo de esta Sección (Capítulo X), calcula los puntos para trazar la carta psicrométrica del sistema aire-agua y se puede modificar para calcular los puntos para otro sistema.

La segunda Sección consta de seis capítulos, en los cuales se diseñan o simulan tuberías y algunos equipos.

En los Capítulos XI y XII, se presentan programas para calcular la caída de presión en una tubería, por la que fluya líquido o gas y un fluido en dos fases, respectivamente. En los Capítulos XIII y XIV, se analizan los problemas de diseñar o simular un compresor centrífugo y un cambiador de calor de tubos y coraza; en el XV se presenta un programa para determinar los perfiles de temperatura, de vapor y de composición en una columna de etapas y en el XVI, se trata el problema de dimensionar un tanque separador de malla.

Estos programas hacen uso de las subrutinas de propiedades de la Sección I y de las subrutinas de métodos numéricos de la Sección III.

Finalmente, en la Sección III, se tratan los métodos numéricos empleados en la solución de los problemas de la Sección II y algunos otros que son complementarios. De acuerdo con lo que se dijo anteriormente, esta Sección debió haber sido la primera, pero se quiso presentar como un apéndice, ya que los métodos numéricos que se analizan se pueden encontrar en muchas obras diferentes.

La Sección se subdivide en ocho capítulos entre los que se tratan tres métodos de solución de ecuaciones: el método de Newton-Raphson, el método de Regula-Falsi y el método de Muller; un método de integración numérica basado en la Regla de Simpson, un método de interpolación polinomial, un método de inversión de matrices, el método de Runge-Kutta para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales de orden n y un programa de regresión basado en el método de mínimos cuadrados que ajusta siete curvas diferentes. Todos los métodos, con excepción del programa de regresión, se presentan en una subrutina que se puede emplear con cualquier programa principal.

Todos los programas y subrutinas que se presentan, vienen acompañados por un ejemplo para ilustrar su uso y hacer ver el tipo de resultados que se pueden obtener con ellos.

Tanto los programas como las subrutinas, están basados en los métodos

dos que se describen en los capítulos respectivos y están hechos de la manera más sencilla que se logró, con el fin de facilitar su entendimiento.

CAPITULO I

C O M P U T A C I O N.

COMPUTADORAS - ESTRUCTURA.

Memoria :

Usualmente consiste de miles de pequeños núcleos magnéticos arreglados en una matriz cúbica. Cuando un núcleo se magnetiza en una dirección dada, almacena un bit de información. El proceso de magnetización se lleva sólo unas cuantas billonésimas de segundo (nanosegundos).

Memoria auxiliar :

Los datos que no se emplean de manera seguida, se almacenan en una memoria auxiliar, la cual puede consistir de tambores magnéticos o discos, capaces de contener billones de bits de información. Otros medios de almacenamiento externo son las cintas magnéticas, las tarjetas perforadas o las cintas de papel. Estos últimos medios no se consideran como parte de la memoria de la máquina.

La memoria de la computadora no sólo guarda los datos y los resultados intermedios asociados con el problema, sino que también guarda las instrucciones del programa, el cual detalla la secuencia de operaciones para llevar a cabo el cálculo. Una instrucción individual puede satisfacer una gran variedad de funciones, de las cuales las más importantes son :

1. - La instrucción puede llamar a los datos de un medio de almacenado

miento externo a la memoria principal.

- 2.- Puede especificar la ejecución de una operación aritmética con -
determinados datos numéricos.
- 3.- Puede hacer referencia a una prueba lógica para determinar el pa-
so siguiente del programa.
- 4.- Puede hacer que los resultados de los cálculos sean mandados de-
la memoria interna a un medio de salida.

Las computadoras son capaces de resolver dos clases de problemas :

- 1.- Directos o explícitos.
- 2.- Iterativos o implícitos.

1.- Directos o explícitos.

El método de solución consiste en llevar a cabo una serie de cálculos en secuencia directa.

Matemáticamente, las relaciones entre las variables conocidas y las -
desconocidas en este tipo de problemas, son de la forma :

$$x = f (u, v, w, y, z)$$

Para conocer el valor de x, solo es necesario tomar los valores cono-
cidos de u, v, w, y, z, del lado derecho de la ecuación, conectando -
las variables.:

2. - Iterativos o implícitos.

En la realidad, las relaciones entre las variables no se pueden expresar siempre en forma explícita; las variables desconocidas están implícitamente relacionadas con las variables conocidas y se tiene entonces una ecuación de la forma :

$$x = f(u, v, w, x, y, z)$$

Esta ecuación no puede ser resuelta directamente para la variable x , ya que no se tiene suficiente información para separarla del lado derecho de la ecuación. Para poder resolver la ecuación es necesario un proceso iterativo (de ensayo y error) para irse aproximando a la solución. La aproximación iterativa es el núcleo del método de computadora para una gran variedad de problemas complejos.

Una computadora resuelve poco a poco el problema, de la misma manera que la resolvería el programador. El programa entonces, no es más que una manera de expresar un concepto humano de la solución del problema; sin embargo, toma en cuenta las peculiaridades, ventajas y limitaciones de la máquina. Por lo tanto, para el hombre como para la máquina, los pasos básicos de la solución del problema son esencialmente los mismos.

Se pueden distinguir seis pasos principales inherentes en la solución de la mayoría de los problemas en la vida real :

1. - Definición del problema :

Se deben listar todos los factores, variables y parámetros que son relevantes y que deben ser considerados en la solución del problema.

2. - Desarrollo de un plan de acción :

Se debe establecer un método de solución (cuando menos); este método de solución debe ser probado para ver si con él se llega a la mejor solución.

Estos dos pasos pueden ser considerados como el proceso de construcción de modelos del problema y de sus posibles soluciones.

3. - Acumulación de la información necesaria :

Se deben buscar todos los datos experimentales y toda la demás información necesaria para poder llegar a la solución del problema, con el modelo seleccionado anteriormente.

4. - Llevar a cabo el cálculo o un análisis lógico :

El cálculo requerido para la solución, de acuerdo con el plan de acción, se lleva a cabo. En algunos tipos de problemas, se requiere de un análisis lógico en lugar de un análisis aritmético.

5. - Decidir entre diferentes alternativas :

Dependiendo de los objetivos y de las restricciones del problema, más de una manera de llevar a cabo la solución puede ser factible.

Los cálculos hechos anteriormente dan soluciones numéricas a cada una de estas alternativas; se debe llegar a una conclusión acerca de cual es la mejor de las alternativas para los requerimientos dados. Si solo existe una manera de resolver el problema, este paso se salta.

6. - Grabación e implementación de la solución :

El último paso en la solución de un problema, es hacer una grabación permanente en forma escrita o gráfica de la solución a la que se llegó después de seguir todos los pasos anteriores.

En las siguientes páginas se presenta un resumen de los aspectos más importantes y de mayor empleo del lenguaje FORTRAN.

LENGUAJE : FORTRAN
OPERADORES ARITMETICOS.

Los operadores válidos en FORTRAN, para poder construir una expresión aritmética, son los siguientes :

OPERADOR	ORDEN	FUNCION
**	1	Exponenciación.
-	2	Cambio de signo.
/	3	División.
*	3	Multipliación.
-	4	Resta.
+	4	Adición.

La presencia de estos operadores indica que se va a efectuar una operación aritmética. El orden especifica la prioridad relativa de los operadores, siendo el de orden menor el que se ejecuta primero. Las operaciones con número de orden igual se efectúan de izquierda a derecha, excepto la exponenciación, la cual se lleva a cabo de derecha a izquierda. El empleo de paréntesis es válido y tienen preferencia -- siempre.

No se permite tener operadores adyacentes, los signos de las constantes se consideran como un cambio de signo; se deben emplear paréntesis para impedir que dos operadores queden uno al lado del otro.

C O N S T A N T E S.

Existen siete tipos de constantes en FORTRAN :

1. - Constantes enteras.
2. - Constantes reales.
3. - Constantes de doble precisión.
4. - Constantes complejas.
5. - Constantes octales.
6. - Constantes hexadecimales.
7. - Constantes lógicas.

Se verán solamente las constantes enteras y las constantes reales; y más adelante también las constantes lógicas.

CONSTANTES ENTERAS.

Una constante entera consiste de uno a once dígitos, los cuales pueden ser precedidos por un signo (+ o -); si la constante no tiene signo, se considera como teniendo un valor positivo.

Ejemplos de constantes enteras válidas :

0	7777777777
+ 0	02550
- 0	1364
26622	- 6 5 (Se interpreta como - 65)

Ejemplos de constantes enteras no válidas :

- | | |
|--------------|---|
| 1.0 | (El punto decimal no es permitido, se interpreta como una constante real). |
| 6,000 | (No se permiten comas o cualquier otro signo de puntuación). |
| 246871310000 | (El número máximo de dígitos está excedido; se interpreta como una constante de doble precisión). |

CONSTANTES REALES.

Una constante real puede consistir de uno a doce dígitos, un punto decimal y un signo opcional (+ o -) o bien puede consistir de una representación escrita en notación científica. Si la constante se escribe en esta última forma, debe consistir de uno a doce dígitos, un punto decimal (opcional), un signo (opcional) y de una E seguida por una constante entera de uno o dos dígitos con o sin signo, la cual constituye el exponente. En cualquier caso, cuando se omite el signo inicial, la constante real se considera como positiva.

En la notación científica empleada en FORTRAN, la E significa que el valor representado es el número que precede a la E multiplicado por 10 elevado a la potencia representada por la constante entera que sigue de la E. De esta manera, la constante real 3 E 2 representa el valor 300.0 (3 multiplicado por 10 elevado a la segunda potencia).

↑
no
permitido

El valor absoluto máximo permitido para una constante real es aproximadamente $4.314E68$ y el valor absoluto mínimo, diferente de cero, permitido, es aproximadamente $8.758E-47$. El cero también se permite.

Ejemplos de constantes reales válidas.

3.14159265359	2.5 E + 07 (25000000)
0.	2 3 4 5 7 8 9 0 1 2 3 E - 2 4
0.0	000000000007.
.075	.5 4 E -5 4 (Se interpreta como - -.089 .54 E - 54)
6.04 E 23	3.9979 E 08

Ejemplos de constantes reales no válidas.

- 1689	(No hay punto decimal o porción E; se interpreta como una constante entera).
7.2 E + 68	(Excede al límite superior permitido).
6.2 E - 48	(Menor al límite inferior permitido).
3.6 E 008	(Constante entera de 3 dígitos en la porción E).
E 22	(La parte del exponente sola no se permite; se interpreta como un nombre de variable).
3,6 E 1.2	(La parte del exponente debe ser una constante entera).
1 E 2 E 3	(Solo se permite una porción E por constante).

3,876,098

(No se permiten comas u otro signo de -
puntuación; únicamente se permite un --
punto decimal).

La representación interna de la máquina, de una constante real es -
esencialmente la misma que la representación interna de una constante
entera. Por lo tanto, las constantes reales y las enteras se pueden
intercambiar en un programa; sin embargo, se debe tener cuidado al
mezclar las constantes, ya que el resultado de la operación se puede
ver afectado y no ser el adecuado.

V A R I A B L E S.

Las variables son nombres simbólicos, los cuales se construyen según reglas apropiadas y que representan valores únicos. Las variables, sin embargo, representan valores que pueden ser alterados durante la ejecución del programa.

NOMBRES DE VARIABLES.

Una variable FORTRAN es un identificador que consiste de una cadena de uno a seis caracteres alfanuméricos (es decir, letras o dígitos), siendo el primer carácter siempre una letra (incluyendo a \$). Si el nombre de la variable excede a seis caracteres, entonces sólo los seis primeros se guardarán internamente. Blancos intermedios son aceptables y son ignorados por el sistema.

Las variables se clasifican en cinco tipos fundamentales :

1. - ENTERAS.
2. - REALES.
3. - DE DOBLE PRECISION.
4. - COMPLEJAS.
5. - LOGICAS.

Se verán solamente las variables enteras y las variables reales. Más adelante también las variables lógicas.

Se asignará un tipo a la variable, de acuerdo con su letra inicial :

Si la letra inicial es I, J, K, L, M ó N la variable será por omisión de tipo entero. Si la letra inicial es cualquier otra letra (incluyendo - \$), entonces la variable será de tipo real. Más adelante se verá cómo cambiar estos tipos.

Ejemplos de variables válidas :

ABK003	Tipo real.
IF	Tipo entero (este nombre de variable es válido ya que no existen palabras reservadas en-FORTRAN).
\$400	Tipo real.
UP DOS	Tipo real; se interpreta como UPDOS.
LI05	Tipo entero.
REAL NUMBER	Tipo real (truncada a seis caracteres y guardada interiormente como REALNU).

Ejemplos de variables no válidas :

3LIO	El nombre de una variable no puede comenzar con un dígito.
BE -GIN	No se permiten otros caracteres que no sean <u>le</u> tras, dígitos o blancos.

A R R E G L O S.

NOMBRES DE ARREGLOS.

Los nombres de los arreglos se construyen de la misma manera que los nombres de las variables pero deben de ser seguidos por una lista de subíndices encerrados en paréntesis. (Se permiten 31 dimensiones). Un nombre de variable es designado como nombre de arreglo - por medio de un declarador apropiado. (Veremos más adelante estos declaradores). Este declarador se emplea para especificar el número máximo y el tamaño de las dimensiones que se desean para el arreglo y debe preceder la primera aparición del nombre del arreglo en una proposición ejecutable. En una unidad dada de un programa, una variable puede aparecer como una variable sencilla o como el nombre de un arreglo pero no ambos. En cualquier lugar donde aparezca el nombre de un arreglo en un programa, este nombre debe de ser seguido inmediatamente por su lista de subíndices. (Hay excepciones que veremos más adelante). Un subíndice puede ser una expresión aritmética de tipo real o entero. Si el subíndice es de tipo real, se trunca para obtener un valor entero. El valor mínimo que puede tener un subíndice es de 1. Un elemento de un arreglo nunca puede contener un número diferente de subíndices al que se indicó al declarar el arreglo.

Ejemplos de elementos de arreglo válidos.

C (I)

BLN 450(8) Se interpreta como BLN450(8)

15(15(3)) El subíndice puede ser a su vez un elemento de un arreglo.

ARRAY2 (I, I, I, I)

R (2. 6) Se interpreta como R(3).

Ejemplos de elementos de arreglo no válidos.

I(I) El subíndice debe ser una expresión aritmética válida, el nombre de un arreglo no constituye esta expresión.

ARREG(0.3) El subíndice 0.3 se redondea a 0.

ARREG(-1) El subíndice no puede ser igual a cero o menor que cero.

3 ARREG (6) El nombre de un arreglo no puede violar las reglas que gobiernan los nombres de variables.

EXPRESIONES ARITMETICAS.

Una expresión aritmética es cualquier constante válida, cualquier variable o función de referencia, o bien una combinación de éstas, separadas por operadores apropiados y paréntesis.

Los tipos de operandos en una expresión aritmética determinan el tipo de valor obtenido de la evaluación de la expresión.

- Cuando se combina un complejo con cualquier otro tipo de valor en una operación, el resultado será complejo.
- Si ninguno de los operandos es complejo y cuando menos uno es de doble precisión, el resultado será de doble precisión.
- Si ninguno de los operandos es complejo o de doble precisión y -- cuando menos uno es real, el resultado será real.
- Sólo cuando todos los operandos son enteros, el resultado será un entero.

Ejemplos de expresiones aritméticas.

$$(A + B) (A - B)$$

$$(A + B) * (A - B)$$

$$\frac{A}{B + C \times D}$$

$$A / (B + C * D)$$

$$\frac{A}{B} \times C + D$$

$$A / B * C + D$$

$$A^2 \times \frac{B^3 + 3}{C}$$

$$A ** 2 * (B ** 3 + 3) / C$$

$$\frac{A^2 + B^2}{\frac{A}{B} + \frac{C}{D}}$$

$$(A ** 2 + B ** 2) / (A/B + C/D)$$

$$\frac{B}{2A} + \left(\frac{3B}{C}\right)^2 - \frac{AD}{C+D+E}$$

$$B/(2*A) + (3*B/C)**2 - A*D/(C+D+E)$$

$$\frac{(A+B+C)^3 \times (A+E+D)^4}{\frac{A^3}{3} + \frac{(A+D)^2}{5} + \frac{C}{D}}$$

$$(A+B+C)**3 * (A+E+D)**4 / (A**3/3 + (A+D)**2/5 + C/D)$$

$$A^b \times C^d - \frac{(C+D)^c}{4A(-B+C-D)^2} \cdot 3A - \frac{(4D+5A)^3}{4A}$$

$$(A**B*C**D - (C+D)**C/(4*A*(-B+C-D)$$

$$**2))*3*A - (4*D+5*A)**3/(4*A)$$

OPERADORES LOGICOS.

OPERADOR	TIPO	ORDEN	FUNCION
.NE.	Relacional	1	No igual que.
.GE.	Relacional	1	Mayor o igual que.
.GT.	Relacional	1	Mayor que.
.IS.	Relacional	1	Equivalente a.
.EQ.	Relacional	1	Igual que.
.LE.	Relacional	1	Menor o igual que.
.LT.	Relacional	1	Menor que.
.NOT.	Lógico	2	Negación lógica.
.AND.	Lógico	3	Conjunción lógica.
.OR.	Lógico	4	Disyunción lógica.

El orden de esta tabla es independiente del orden empleado para los operadores aritméticos. Si se unen las dos tablas, el orden de los operadores lógicos sigue del de los operadores aritméticos.

CONSTANTES LOGICAS.

FORTRAN permite el empleo de operaciones lógicas por medio de expresiones lógicas. Existen dos constantes lógicas para representar los valores lógicos "verdadero" y "falso".

Estas constantes tienen la forma :

. TRUE .

. FALSE .

La representación interna es tal, que las palabras correspondientes a la constante .TRUE. y al entero 1 son idénticas y las palabras correspondientes a la constante .FALSE. y al entero 0 son idénticas.

VARIABLES LOGICAS.

Estas variables no tienen tipo por omisión, se les debe asignar su tipo por medio de una proposición de tipo; en este caso :

LOGICAL Nombre de la variable.

EXPRESIONES LOGICAS.

Una expresión lógica consiste de cualquier combinación válida de primarios lógicos, operadores lógicos y paréntesis.

Un primario lógico puede ser una constante lógica, una variable lógica, o función de referencia, una expresión relacional o una expresión

lógica en paréntesis.

Una expresión relacional consiste de dos expresiones aritméticas separadas por uno de los siete operadores relacionales y representa el valor `.TRUE.` o `.FALSE.` según sea la relación. La relación `.IS.` es verdadera sólo si las palabras en los dos lados del operador son idénticas (los 48 o 96 pares de bits concuerdan).

Una expresión lógica representa el valor obtenido cuando las operaciones lógicas indicadas se llevan a cabo.

La negación lógica `.NOT.` cambia el valor a su complemento; por ejemplo : si `A.GT.B` es verdadera, `.NOT. (A.GT.B)` será falsa. (Una expresión de relación que siga de `.NOT.` debe siempre de estar contenida en paréntesis).

Ejemplos de expresiones lógicas válidas :

`A . AND . . NOT . B`

`C . GT . D`

`L + 2 . LT . FUN (L, 8, R)`

`A . OR . X (20)`

A y B son primarios lógicos

`L + 2, C y D` son expresiones aritméticas.

`FUN` representa el valor obtenido de la evaluación de una función lógica.

El arreglo `X` también es lógico.

Ejemplos de expresiones lógicas no válidas :

I + J : El operador + es ilegal.

A + B . OR . C + D : La expresión tiene expresiones aritméticas, no primarios lógicos.

AND (A , B) : Si se ejecuta un AND intrínseco se obtiene un valor real, no lógico.

P R O P O S I C I O N E S .

Un programa en FORTRAN consiste de una secuencia de proposiciones. Estas proposiciones se clasifican en : proposiciones ejecutables y proposiciones no ejecutables.

Una proposición ejecutable es una instrucción que hace que se lleve a cabo una acción en el punto del programa donde se encuentre; por ejemplo : que se transfiera el control, que se tome una decisión, - que se lea un conjunto de datos, que se pare el programa, etc.

Una proposición no ejecutable da información al compilador FORTRAN por ejemplo : le da información acerca de las localidades de memoria que requiere el programa, acerca de los valores iniciales que - pueden tener algunas variables, acerca de la forma en que se deben leer los datos o imprimir los resultados, etc.

FORMA DE LAS TARJETAS DE UN PROGRAMA ESCRITO EN FORTRAN.

Las tarjetas de un programa escrito en FORTRAN deben de perforarse de la siguiente manera :

- 1.- Cualquier proposición FORTRAN (ejecutable o no ejecutable) debe de comenzar a perforarse en la columna 7 de la tarjeta.
- 2.- Ninguna proposición FORTRAN (ejecutable o no ejecutable) puede

pasar de la columna 72 (en el caso de que suceda esto, la computadora ignorará la parte de la proposición que pase de esta columna).

3. - En el caso de que la proposición sea tan grande que no quepa en el intervalo comprendido entre las columnas 7 y 72, se debe emplear una tarjeta de continuación; para indicar que una tarjeta es continuación de la anterior se debe perforar un carácter en la columna seis (todos los caracteres con excepción del 0 son válidos para este fin).
4. - Una tarjeta puede estar etiquetada de manera que se pueda hacer referencia a la proposición que contiene. Se pueden emplear las cinco primeras columnas de la tarjeta para poner etiquetas. Ninguna etiqueta puede aparecer más de una vez en una misma unidad de programa. Se permiten etiquetas en todas las proposiciones ejecutables y en la proposición no ejecutable FORMAT, en el caso de que se etiquete cualquier otra proposición no ejecutable, es ignorada por el compilador FORTRAN.

Una etiqueta consiste en un número sin signo (del 1 al 99999).

PROPOSICIONES DE ASIGNACION.

Las proposiciones de asignación permiten que el valor aritmético, lógico o el de una etiqueta sea asignado a una variable del programa.

Las formas de esta proposición son :

var = ex

ASSIGN n TO k

donde var y ex son, ya sea una variable no lógica y una expresión aritmética o una variable lógica y una expresión lógica, respectivamente. n es la etiqueta de una proposición y k es una variable de precisión simple.

Cuando se ejecuta la primera forma de esta proposición, el valor obtenido de la expresión se asigna a la variable var. En el caso de que la variable y la expresión sean de tipos diferentes, se llevará a cabo una conversión y el valor final será del mismo tipo que el de la variable (en el caso de un valor real que sea convertido a entero y que tenga entonces un valor mayor que el permitido para constantes enteras, el programa se parará).

En el caso de una variable y una expresión lógicas, el valor obtenido de la expresión, falso o verdadero, será guardado por la variable.

La segunda forma sirve para emplear la variable k en un GO TO -- asignado.

TRANSFERENCIA DE CONTROL.

Existen en FORTRAN 5 proposiciones ejecutables por medio de las cuales se puede transferir el control a otra parte del programa. Estas proposiciones son :

- El IF aritmético.
- El GO TO incondicional.
- El GO TO asignado.
- El GO TO calculado, y
- El IF lógico.

IF Aritmético.

La forma del IF aritmético es :

IF (A) k, l, m

Donde A es una expresión aritmética y k, l y m son etiquetas que -- aparecen en la misma unidad del programa donde se encuentra la proposición IF

ERROR 2 COMPILACION ABORTED

En el programa, al encontrarse un IF aritmético, se evalúa la expresión aritmética A y el control se transfiere a la ética k, a la l o a la m si el valor de la expresión es negativo, cero, o positivo respectivamente.

No es necesario que los números de etiquetas k, l y m sean todos diferentes, por ejemplo , si tenemos :

IF (A * B - C) 2, 2, 1

El control se transferirá a la etiqueta 2 si el valor de $A * A - C$ es negativo o nulo y se transferirá a la etiqueta 1 si es positivo.

Es necesario que la proposición que sigue de un IF aritmético esté etiquetada, ya que de no ser así, no hay manera de llegar a ella.

GO TO Incondicional.

La forma más sencilla de la proposición GO TO es el GO TO incondicional, la cual tiene la forma :

GO TO i

donde i es un número de una etiqueta que aparece en la misma unidad de programa que la proposición GO TO.

Si en la ejecución de un programa se encuentra un GO TO incondicional, el control se transfiere automáticamente a la proposición con la etiqueta especificada.

GO TO Asignado.

El GO TO asignado tiene dos formas :

GO TO i, (lista)

y GO TO i

donde i es una variable entera y lista es una lista de etiquetas separadas por comas.

La ejecución de esta proposición hace que el control se transfiera a

la proposición cuya etiqueta tenga el último valor que haya sido asignado a la variable *i* en una proposición ASSIGN; si no se asigna un valor a la variable *i* con una proposición ASSIGN, esto causará la terminación del programa cuando se ejecute el GO TO.

GO TO Calculado.

La forma del GO TO calculado es :

GO TO (lista), e a

donde lista es una lista de etiquetas y e a es una expresión aritmética.

Esta proposición hace que el control se transfiera a una proposición cuya etiqueta aparezca en la lista. La transferencia de control se lleva a cabo de acuerdo con el valor que tenga la expresión aritmética e a; esta expresión aritmética se evalúa, se redondea si su valor no es entero y se emplea para escoger una de las etiquetas de la lista; si la expresión tiene el valor *n* después de haber sido evaluada, el control se transferirá a la *n*-ésima etiqueta de la lista.

Si el número de etiquetas en la lista es menor que *n* o si el valor de e a es menor o igual a cero, el control pasará a la proposición siguiente del GO TO calculado.

I F Lógico.

La forma del I F lógico es :

I F (e1) p

donde e l es una expresión lógica y p es cualquier proposición ejecutable, excepto una proposición DO u otro IF lógico.

Cuando en la ejecución de un programa se llega a un IF lógico se evalúa la expresión lógica e l; si esta expresión lógica es verdadera (.TRUE.) se ejecuta la proposición p ; si es falsa (.FALSE.) entonces se ignora la proposición p . En todos los casos, el control pasa a la proposición que sigue del IF lógico, a menos que la proposición p cause una transferencia de control a otra parte del programa.

PROCESOS ITERATIVOS.

Muchas veces es necesario hacer un cálculo o alguna asignación un número repetido de veces. En FORTRAN esto se puede llevar a cabo de una manera fácil por medio de la proposición DO.

La proposición DO es una proposición de control que permite que un cierto número de proposiciones se ejecuten de manera repetida mientras cambia el valor de una variable dentro de límites específicos.

La proposición DO tiene la forma :

$$\text{DO } k \text{ } i = a, b, j$$

ó bien :

$$\text{DO } k \text{ } i = a, b$$

donde k es la etiqueta de una proposición ejecutable que se encuentra después de la proposición DO, i es el nombre de la variable de control y a , b y j son el parámetro inicial, el parámetro final y el parámetro de incremento respectivamente. Cada uno de estos parámetros es una expresión aritmética.

El rango de un DO se define como el conjunto de proposiciones que se encuentran entre la proposición DO y la proposición que tenga la etiqueta k . Los parámetros del DO pueden ser cualquier variable entera o real; si no se especifica un parámetro de incremento se supondrá un valor de 1.

Cada vez que se ejecuta el rango de un DO se asigna un nuevo valor a la variable de control por medio del parámetro de incremento j . Antes de cada repetición, la variable de control se incrementa en un valor igual al del parámetro de incremento.

Inmediatamente después de haberse incrementado la variable de control se hace una prueba para determinar si el valor del parámetro final no ha sido excedido; si el valor de la variable de control es inferior o igual al valor del parámetro final se repetirá el rango del DO; si el valor del parámetro final ha sido excedido, el DO se considerará como satisfecho. (En cualquier caso, el rango del DO se ejecuta cuando menos una vez).

Cualquier número de proposiciones DO puede emplearse dentro del rango de una proposición DO pero no se permite que la proposición final de los primeros quede colocada después de la proposición final del DO principal. (Se permite que dos o más proposiciones DO tengan la misma proposición final).

La variable de control, así como los parámetros final y de incremento, pueden ser modificados dentro del rango del DO; la variable de control puede ser empleada dentro del rango del DO.

El control puede transferirse a una proposición que esté fuera del rango del DO por medio de una proposición que se encuentre dentro

del mismo; el control también puede llegar a alguna proposición dentro del rango de una proposición DO. Sin embargo, en este caso se debe tener cuidado con respecto al valor que tenga la variable de control al llevarse a cabo la transferencia.

PROPOSICION CONTINUE.

Esta proposición es una proposición muda, ejecutable, la cual no produce ninguna acción; es de gran ayuda para colocar una etiqueta en cualquier parte del programa y así poder transferir el control a esta parte. También es de gran utilidad como proposición final en el rango de un DO en los casos en los que no se desee ejecutar algunas de las proposiciones que se encuentren dentro del rango, por ejemplo :

```

DO 8 I = 1, 20
  A ( I ) = B ( I ) + D
  I F ( A ( I ) . GT . 2000.0 ) GO TO 8
  F ( I ) = A ( I ) * X + Y
8  CONTINUE

```

Si no existiera la restricción que A (I) tiene que ser menor o igual a 2000, para que F (I) pueda tener un valor, se podría escribir :

```

DO 8 I = 1, 20
  A ( I ) = B ( I ) + D
8  F ( I ) = A ( I ) * X + Y

```

Debido a la restricción, la etiqueta 8 no puede quedar colocada en la proposición de asignación $F(I) = A(I) * X + Y$, aunque se coloque la proposición `IF (A(I) .GT. 2000.0) GO TO 8`, ya que de ser así, aquella se ejecutaría de cualquier manera. En este caso, el empleo de la proposición `CONTINUE` es indispensable.

ENTRADA - SALIDA.

Las proposiciones de entrada - salida constituyen la forma de dar información a la computadora, o bien de obtener información de ella, - es decir, los resultados deseados.

Existen en FORTRAN varias proposiciones de entrada - salida pero so lo veremos tres de ellas :

- La proposición READ.
- La proposición WRITE.
- La proposición PRINT.

PROPOSICION READ.

Algunas de las formas más empleadas de esta proposición son :

READ (nar, k) lista

READ k, lista

READ (nar, k, lcr) lista

donde :

nar : es una expresión aritmética que designa un archivo.

k : es la etiqueta de una proposición FORMAT que se encuentra en la misma unidad de programa, (o bien, en el caso de la B-6700 de la U.N.A.M., puede ser una /, la cual indica que la entrada es libre). (La proposición FORMAT se verá más adelante).

lista : es una lista de entrada - salida y

lcr : es una lista de cláusulas de resultado de las cuales -
 existen varias también; dentro de estas cláusulas ver
 mos los especificadores de acción siguientes :

ERR = l

END = m

Una lista de entrada - salida consiste de uno o más nombres simbóli
 cos los cuales denotan localidades de memoria a las cuales o de las
 cuales se van a transferir datos cuando se ejecute la proposición. -
 Los datos se transfieren en el orden indicado por los nombres en la
 lista. Una lista de entrada - salida puede ser :

- Una lista sencilla de entrada - salida la cual puede consistir de un
 nombre de variable, de un elemento de un arreglo, de un nombre
 de un arreglo o una expresión aritmética. (Este último caso se --
 emplea en la salida, para imprimir el valor de la expresión en el
 momento de ejecutarse la proposición).
- Una lista de entrada - salida con una especificación de DO implícito.
 En este caso, la lista debe de ser seguida inmediatamente por una
 coma y por una especificación de DO implícito y todo se encierra-
 entre paréntesis. Una especificación de DO implícito se construye-
 de la misma manera de la proposición DO vista anteriormente, y -
 tiene la forma :

(lista, h = x, y, z)

o bien :

(lista, h = x, y)

en la cual h es la variable de control y x, y y z son el parámetro inicial, el parámetro final y el parámetro de incremento, respectivamente.

Un ejemplo de una lista válida de entrada - salida con una especificación de DO implícito puede ser :

(H (I), C, B(I), I = 1, 5)

Una lista de entrada - salida puede consistir de cualquier combinación de listas sencillas o de listas con una especificación de DO implícito, separados por comas. Una lista de este tipo puede tener paréntesis para agrupar; por ejemplo :

(A, (B (I), I = 1, 10, 2)), X

En el caso de una lista de entrada - salida con una especificación de DO implícito se leen o escriben valores en orden hasta que el DO se satisfaga. En el caso de que aparezca el nombre de un elemento, A (5) por ejemplo, en una lista de entrada - salida, se leerá solamente ese elemento, mientras que si aparece el nombre de un arreglo, A, se leerán todos los elementos del arreglo, variando el primer subíndice más rápido y el último más lentamente, por ejemplo, en caso de una matriz (dos dimensiones), la lectura se hará por columnas.

Los especificadores de acción $END = m$ y $ERR = 1$ se pueden emplear con una proposición $READ$ que tenga un designador de archivo; m y 1 son etiquetas de proposiciones que se encuentran en la misma unidad de programa que la proposición $READ$.

Especificación de acción $END = m$.

Cuando este especificador aparece en una proposición $READ$, el control pasará automáticamente a la proposición con la etiqueta m cuando ocurra una condición de fin de archivo. Si la lectura se hace por medio de tarjetas, esta condición ocurre cuando se trata de leer una tarjeta que tenga un ilegal en la primera columna.

Especificación de acción $ERR = 1$.

Este especificador hace que el control pase automáticamente a la proposición con la etiqueta 1 cuando exista un error de paridad en la -- transferencia de datos. Si esto ocurre, el bloque en el cual exista el error de paridad aún puede ser procesado. El especificador $ERR = 1$ impedirá que el programa se pare en ese lugar y el siguiente bloque puede ser procesado si el error de paridad no ocurre en él.

PROPOSICION WRITE.

Algunas de las formas más usuales de esta proposición son :

WRITE (nar , k) lista

WRITE (nar , k, lcr) lista

WRITE (nar , k)

WRITE (nar, k, lcr)

donde :

nar : es una expresión aritmética que designa un archivo.

k : es la etiqueta de una proposición FORMAT que se encuentra en la misma unidad del programa (o bien una diagonal).

lista : es una lista de entrada - salida (esta lista puede tener cualquiera de las formas descritas en la proposición - READ) y

lcr : es una lista de cláusulas de resultado entre las cuales se puede emplear los especificadores de acción END = m y ERR = l.

PROPOSICION PRINT.

Esta proposición es una variación de la proposición WRITE. En esta proposición no se permite ninguna cláusula de acción y el archivo no se especifica de manera explícita. Esta proposición tiene las formas:

PRINT k

PRINT k, lista

donde :

k : es la etiqueta de una proposición FORMAT que esté en la misma unidad de programa o una diagonal (en la segunda forma) y

lista : es una lista de entrada - salida la cual puede tener las formas descritas anteriormente.

PROPOSICION NAMELIST.

En todos los casos anteriores la k se puede sustituir por el nombre de un NAMELIST, en este caso no es válido tener una lista de entrada-salida puesto que ésta se especifica en una proposición NAMELIST.

La proposición NAMELIST tiene la forma :

NAMELIST / nombre / lista ...

donde :

nombre : es un identificador que se construye de la misma forma que el nombre de una variable.

lista : es un grupo de nombres de variables o arreglos se parados por comas, y

... : indica que se pueden tener tantas repeticiones de la forma /nombre /lista como se deseen.

En la entrada se leerán las variables del grupo lista, en el orden que se desee y no necesariamente todas según el formato :

- En la columna 2 se perfora un signo &.
- En la columna 3 se perfora el nombre del NAMELIST.
- Es obligatorio dejar cuando menos un blanco después del nombre.
- Después de esto se perfora un nombre del grupo lista seguido por un signo de igualdad y su valor (o valores separados por comas, si es el nombre de un arreglo); al finalizar los valores, se perfora una coma y se puede perforar otro nombre del

grupo lista y su(s) valor(es) de la misma manera.

- El NAMELIST se termina perforando &END después del último valor.
- Si el nombre del grupo lista es un arreglo se puede dar valor nada más a algunos elementos, especificando los subíndices correspondientes.
- Es válido emplear valores de repetición : en vez de repetir n veces un mismo valor, es posible ponerlo una sola vez precedido por n*

Ejemplo :

```
NAMELIST /EJEM /A1, B1, C1, D1
```

donde A1 y C1 son vectores de 10 y 20 elementos respectivamente.

Un ejemplo del empleo de este NAMELIST puede ser :

```
&EJEM B1 = 'METANO', A1 (8) = 5.0,  
C1 = 1.0, 2.0, 3.0, 17 * 0.0&END
```

En la salida, el efecto es similar excepto porque se imprimen todos los valores en el orden en el que se especificaron en la proposición NAMELIST.

PROPOSICION FORMAT.

La proposición FORMAT da a la computadora información acerca de la forma en la que deben entrar los datos y en la que deben salir los resultados.

Existen varias especificaciones que se pueden emplear en la proposición FORMAT, veremos las siguientes :

Especificación I w

Especificación F w . d

Especificación E w . d

Especificación E w . d con factor de escala.

Especificación A w

Especificación X ó w X

Especificación ' s '

Especificación T c

ESPECIFICACION I w.

La especificación I w se emplea para números enteros.

En la entrada el número se justifica a la derecha y los caracteres en blanco se interpretan como ceros :

Ejemplos de números leídos con la especificación I w :

Número leído	Especificación	Valor Interno
655	I 3	+ 655
bb - 42	I 5	- 42

- bbb 32	I 6	- 32
39 bbbb	I 6	+ 390000

En la salida, el número se justifica a la derecha y se imprime en un campo de tamaño w , el número se imprimirá como un entero. Si el número que se va a imprimir requiere de un campo mayor que w se imprimirán w asteriscos. Si se imprime un valor con punto flotante - con esta especificación, el valor se redondeará a un entero antes de imprimirse.

Ejemplos de números escritos con la especificación $I w$:

Valor interno	Especificación	Número impreso
+ 55	I 2	55
+ 78	I 4	bb 78
- 96	I 3	- 96
+ 78901	I 4	****
+ 7.6	I 2	b 8

ESPECIFICACION F w . d.

Esta especificación se emplea para la entrada o la salida de números reales.

En la entrada se leerá un número real en un campo w . El punto decimal se puede colocar por medio de la parte d de la especificación, - o bien donde se desee dentro del campo w . Si no se coloca un punto decimal, éste se supondrá d lugares contando de derecha a izquierda.

El campo w debe ser mayor o igual que d y debe incluir al punto decimal y al campo de un exponente en notación científica en el caso de que estén presentes.

Ejemplos de números leídos con la especificación $Fw.d$:

Número leído	Especificación	Valor interno
47813025	F 8.3	47813.025
47.81302	F 8.3	47.81302
- 379021.	F 8.4	- 379021
b - bb 456	F 7.2	- 4.56
57032.E2	F 8.3	5703200
- 33.06 E-1	F 9.4	- 3.306

En la salida el número se imprime en un campo de tamaño w como un real expresado sin notación científica. El punto decimal se ajusta de manera que queden d dígitos después del mismo. El número se justifica a la derecha y el campo w debe ser mayor o igual al número de decimales especificado, más uno; también se debe tomar en cuenta la posibilidad de que el número sea negativo y tenga, por lo tanto, un signo $-$. El valor interno se redondea de manera de satisfacer la especificación del punto decimal y el campo se llenará de asteriscos si la parte entera es tan grande que no quepa en el campo w .

Ejemplos de números escritos con la especificación $Fw.d$:

Valor interno	Especificación	Número impreso
+ 47.8494	F 7.3	b 47.849
+ 47.8494	F 10.3	bbbb 47.849
- 0.0026	F 6.3	- 0.003
+ 78.432	F 6.3	78.432
+ 678.43	F 6.4	*****

ESPECIFICACION E w . d.

Esta especificación se emplea para leer o escribir números reales; - permite que se tengan tantos decimales como se desee por medio de la parte d de la especificación. Si no aparece un punto decimal, éste se supone d lugares contando de derecha a izquierda o bien comenzando a la izquierda del exponente E si éste existe.

El campo w debe ser mayor o igual que el número de lugares decimales especificado, d. Un blanco se interpreta como un cero.

Ejemplos de números leídos con la especificación E w . d :

Número leído	Especificación	Valor interno
bbbb 5432	E 8.4	0.5432
bbb 54.32	E 8.4	54.32
- bb 67534 E-3	E 11.4	- 0.0067534
- bb 67.53431	E 11.4	- 67.53431

En la salida, empleando esta especificación, se imprimirá un número real en notación científica, en un campo w. El exponente se ajusta de

manera que el punto decimal quede colocado según d .

El campo w debe ser mayor o igual al número de decimales, más 7. (2 lugares para el exponente, uno para la letra E, uno para el signo del exponente, uno para el punto decimal, uno para el signo de la mantisa y uno para un cero antes del punto decimal), si se viola esta regla, el campo se llenará de asteriscos.

El número real se justifica a la derecha y se redondea a una mantisa de d dígitos.

Ejemplos de números escritos con la especificación $E w . d$:

Valor interno	Especificación	Número impreso
47.879	E 11.4	0.4788 E b 02
48.596	E 15.9	*****

FACTOR DE ESCALA.

Las especificaciones F y E pueden ser precedidas por un designador de factor de escala para modificar la escala de un número, tanto en la entrada como en la salida. Un designador de factor de escala tiene la forma :

$$sP$$

donde s es el factor de escala y consiste de una constante entera.

Especificación F.

En la lectura, el número leído con una especificación F con factor de escala, se guardará internamente como el valor leído dividido entre

10 elevado a una potencia igual al factor de escala, por ejemplo, el número 479.85 leído con 2PF6.2 se guardará internamente como -- 4.7985.

En la escritura, el valor impreso será igual al valor impreso multiplicado por 10 elevado a una potencia igual al factor de escala, por ejemplo, el número interno 4.7985 impreso con 2PF6.2 dará 479.85.

Especificación E.

La lectura de un número con la especificación E con factor de escala se hace de la misma manera que si no se tuviera éste último.

En la salida se tienen dos casos :

- Si el factor de escala es negativo o nulo se imprimirán 5 ceros -- después del punto decimal y $d - s$ cifras significativas después de los ceros.
- Si el factor de escala es positivo, se imprimirán s cifras significativas a la izquierda del punto decimal y $d - s + 1$ cifras significativas a la derecha del mismo.

Por ejemplo :

El número 43.7828 quedará impreso como 0.00438 E+04 con una especificación de -2PE12.5 y como 43.7828 E+00 con una especificación de +2PE12.5.

En una proposición FORMAT, el factor de escala afecta a las especificaciones que lo tengan y también a las especificaciones siguientes a

menos que aparezca otro factor de escala. (En el caso de que no se quiera que una especificación se vea afectada por ningún factor de escala y la especificación anterior tenga uno, deberá emplearse 0P).

En el caso de que una especificación tenga un contador de repetición, el factor de escala debe preceder inmediatamente a este contador. - (2P3E20.6 por ejemplo).

ESPECIFICACION DE FORMAT LIBRE.

Esta especificación consiste nada más de una diagonal (/).

En la entrada, los valores que se van a leer deben ir separados por comas y no importa el campo que ocupen.

En la salida los valores se imprimirán uno tras otro, separados por comas y con especificaciones que la computadora misma les asignará según su orden de magnitud.

ESPECIFICACION A w .

Esta especificación se emplea para variables alfanuméricas, es decir, cadenas de caracteres arbitrarios.

En la entrada, los caracteres se almacenan internamente justificados a la izquierda con blancos si es que la variable contiene menos de seis caracteres ya que se permiten seis caracteres máximo por variable alfanumérica; si el campo w excede de seis, se almacenarán los-

seis caracteres de la derecha y los de la izquierda son ignorados. -
La variable puede ser de tipo real o entero.

Ejemplos de variables alfanuméricas leídas con A W :

Variable	Especificación	Valor interno
ABCD	A 4	ABCDbb
ABCDEF	A 4	ABCDbb
ABCDEF	A 6	ABCDEF
JKLMNOPABCDEF	A 10	ABCDEF

En la salida, la especificación A W hace que los caracteres se escriban en forma de una cadena de tamaño W. Si W es mayor que seis, - los caracteres se colocarán justificados a la derecha, precedidos por blancos. Si W es menor o igual a seis, se escribirán los W caracteres de la izquierda.

Ejemplos de variables escritas con la especificación A W :

Valor interno	Especificación	Variable impresa
ABCDEF	A 3	ABC
ABCDEF	A 7	bABCDEF

ESPECIFICACION X ó w X.

Esta especificación hará que se salten w espacios, tanto en la entrada como en la salida. La especificación X ó 1 X hará que se salte un espacio.

ESPECIFICACION wHs ó 's'.

Esta especificación se conoce como especificación Hollerith y permite que cadenas de caracteres sean leídas o impresas sin empleo de memoria. La cadena puede tener hasta 264 caracteres. El campo W, si se emplea la primera forma, debe ser un número que represente el número de caracteres de la cadena, por ejemplo : si tenemos

1 FORMAT ('RESULTADOS:')

la cadena de caracteres RESULTADOS: podrá ser impresa si se pide que se imprima el format 1.

ESPECIFICACION Tc.

Esta especificación actúa como un tabulador y hará que se llegue a la posición c, tanto en la entrada como en la salida.

Por ejemplo, si se tiene la especificación

1 FORMAT (T 51, A6)

en la lectura se comenzará a leer a partir de la columna 51 en la -- tarjeta.

En la escritura se comenzará a imprimir en el espacio 51 de la hoja de impresión.

DIAGONALES.

Una diagonal en una proposición FORMAT indica :

En la entrada, que la lectura se continúa en la siguiente tarjeta. (Si -

hay más de una diagonal, se saltarán tantas tarjetas como diagonales haya, menos una).

En la salida, que la impresión continúa en el renglón siguiente. (Si hay más de una diagonal, se saltarán tantos renglones como diagonales haya, menos uno).

CONTROL DEL CARRO DE IMPRESION.

Existen varios caracteres que se emplean en el momento de escribir. Estos caracteres se colocan en la primera columna de impresión e indican la manera en que la impresión se va a llevar a cabo.

Estos caracteres se colocan en las proposiciones FORMAT en especificaciones Hollerith y son :

Carácter	Efecto.
Blanco	Se imprime con espacio sencillo.
0	Se imprime a doble espacio.
1	Se salta a la siguiente página antes de imprimir.
+	Se imprime sobre la misma línea.

DECLARACION DE UNA FUNCION.

La declaración de una función tiene la forma :

$$t f (\text{lista}) = \text{ex}$$

Donde f es el nombre de una función, lista es una lista de argumentos mudos o formales, separados por comas y ex es una expresión, - todo en una sola proposición; t es una especificación de tipo (opcional) para la función (REAL, COMPLEX, etc.).

Se puede hacer referencia a la función únicamente en la unidad de -- programa donde aparezca esta declaración. El valor obtenido cuando se hace referencia a la función, depende del tipo del nombre de la - función (cuando no se especifica tipo, los tipos para los nombres de estas funciones son los mismos que para los nombres de las varia-- bles). La lista de argumentos mudos puede consistir únicamente de - nombres de variables.

La función se ejecuta cuando se hace referencia a ella y el valor obtenido se regresa al punto donde se hizo esta referencia.

La referencia a una función, en una expresión, tiene la forma $f (\text{lista } l)$, donde f es el nombre de la función y $\text{lista } l$ es una lista de argumentos reales (es decir no formales) los cuales pueden ser únicamente expresiones.

SUBPROGRAMA DE FUNCION.

Un subprograma de función consta de una secuencia de proposiciones iniciadas por una proposición FUNCTION y terminadas por una proposición END.

PROPOSICION FUNCTION.

Esta proposición es no ejecutable, indica el inicio de un subprograma de función y especifica los argumentos mudos que se emplean en el subprograma para obtener el valor de la función.

La forma de esta proposición es :

t FUNCTION f (lista)

donde f es el nombre de una función, lista es una lista de argumentos mudos separados por comas y t es el tipo de la función (opcional).

Un nombre de función se construye de la misma manera que un nombre de variable y tiene el mismo tipo que el de las variables según es la letra con la que comienza, a menos que se declare otro tipo.

Una vez que se ha empleado un nombre como nombre de una función, no se puede emplear para ningún otro fin en ese programa.

LISTA DE ARGUMENTOS.

La lista de argumentos mudos o formales debe consistir de cuando menos un argumento. Cada uno de los elementos de la lista puede --

ser un nombre de variable, un nombre de un arreglo, un nombre de función o de subrutina o un asterisco. Si el argumento mudo es un nombre de variable, el argumento real (no formal), cuando se haga referencia a la función, deberá ser también un nombre de una variable, un elemento de un arreglo o una expresión. El argumento real debe ser del mismo tipo que el mudo. Si el argumento mudo es un nombre de un arreglo, el argumento real puede ser un nombre de un arreglo o un elemento de un arreglo. En este último caso, el argumento real puede ser considerado como un arreglo cuyo primer elemento es ese elemento. Debe tenerse cuidado de que el arreglo en el subprograma no tenga una dimensión mayor que el arreglo correspondiente en el programa principal.

Un asterisco en una lista de argumentos mudos guarda esa posición en la lista para una etiqueta de una proposición precedida por un & en la lista de argumentos reales. Este argumento se emplea con la proposición RETURN no estandard.

FUNCIONES INTRINSECAS.

Existen ciertas funciones a las cuales se puede hacer referencia y que no necesitan ser especificadas mediante una declaración de función.

Las más usuales de estas funciones son :

FUNCION	ARGUMENTO(S)	SIGNIFICADO
ACOS (X)	REAL	Arc cos X
ACOSH (X)	REAL	Arc cosh X
AINT (X)	REAL	Elimina la parte fracciona ria de X
ALOG (X)	REAL	\ln X
ALOG10 (X)	REAL	log X
AMAX0 (X ₁ , X ₂ , ..., X _n)	ENTEROS	Selecciona el mayor de - los argumentos.
AMAX1 (X ₁ , X ₂ , ..., X _n)	REALES	Selecciona el mayor de - los argumentos.
ASIN (X)	REAL	Arc sen X
ASINH (X)	REAL	Arc senh X
ATAN (X)	REAL	Arc tan X
ATANH (X)	REAL	Arc tanh X
COS (X)	REAL	Cos X
COSH (X)	REAL	Cosh X
EXP (X)	REAL	e ^X

FUNCION	ARGUMENTO(S)	SIGNIFICADO
SIN (X)	REAL	sen X
SINH (X)	REAL	senh X
SQRT (X)	REAL	X
TAN (X)	REAL	tan X
TANH (X)	REAL	tanh X



SUBPROGRAMA DE SUBROUTINA.

Una subrutina es una secuencia de proposiciones iniciadas por una proposición SUBROUTINE y terminadas por una proposición END.

PROPOSICION SUBROUTINE.

La proposición SUBROUTINE es no ejecutable, indica el inicio de un subprograma de subrutina y puede especificar los argumentos mudos empleados en esa subrutina.

La forma de esta proposición es :

SUBROUTINE S

o bien

SUBROUTINE S (lista)

donde S es el nombre de la subrutina y lista es una lista de argumentos mudos separados por comas.

El nombre de una subrutina se construye de la misma manera que un nombre de variable; este nombre no tiene asociado ningún tipo. Una vez que se emplea un nombre como nombre de una subrutina, no se puede emplear para otro propósito en ese programa.

LISTA DE ARGUMENTOS.

La lista de los argumentos de la proposición SUBROUTINE se define de la misma manera que la lista de argumentos de la proposición FUNCTION.

Las proposiciones ejecutables en una subrutina se ejecutan cuando la subrutina es llamada por una proposición CALL. La subrutina puede hacer que el programa se pare mediante una proposición STOP o puede hacer que el control regrese al programa principal mediante la proposición RETURN.

Cualquier cambio ocurrido en el valor de un argumento mudo en la subrutina se reflejará en un cambio idéntico en el valor del argumento real en el programa principal cuando el control regrese a éste último, a menos que el argumento sea una expresión.

PROPOSICION CALL.

La proposición ejecutable CALL hace que la subrutina especificada se ejecute. Las formas de la proposición CALL son :

CALL S

o

CALL S (lista)

donde S es el nombre de una subrutina y lista es una lista de argumentos reales separados por comas.

Los elementos de esta lista deben concordar en número, orden de aparición y tipo con los argumentos mudos que aparecen en la proposición SUBROUTINE.

Los argumentos posibles en esta proposición pueden ser : una variable

simple, un elemento de un arreglo, un nombre de un arreglo, una expresión, un nombre de una función o de una subrutina, o bien el número de una etiqueta precedida por un &. Si alguno de los argumentos es una expresión aritmética, ésta se evalúa en el momento de ejecutarse la proposición CALL.

Si el argumento real, en la proposición CALL es un nombre de un arreglo, la subrutina puede tener acceso al arreglo completo. El arreglo mudo puede tener la dimensión que se desee; los subíndices que aparecen en el declarador del arreglo mudo determinan el número de elementos del arreglo a los que se hace referencia cuando el nombre del arreglo aparece solo en una lista de entrada-salida en la subrutina, así como la correspondencia entre los argumentos reales y mudos. Por ejemplo, si el arreglo A con una dimensión de 20 se hace corresponder a un arreglo B con una dimensión de 5 en la subrutina, ésta tiene acceso a los 20 elementos del arreglo A pero si se imprime el arreglo B, sólo se imprimirán los primeros 5 elementos de A.

Si la subrutina no hace que el programa se pare por medio de una proposición STOP, el control regresará a la primera proposición ejecutable que se encuentre después de la proposición CALL en el programa que la llamó, o bien, a la etiqueta que se encuentre precedida por un & en la lista de argumentos de la proposición CALL, si el regreso fué por medio de un RETURN no estandar.

PROPOSICION RETURN.

La proposición ejecutable RETURN se emplea en los subprogramas, tanto de función como de subrutina para hacer que el control regrese al programa que hizo referencia a alguna de éstas últimas. El punto de este programa al cual regrese el control depende de la forma de la proposición RETURN empleada.

Las formas de la proposición RETURN son :

RETURN

RETURN a

La primera de estas formas se conoce como RETURN estandar.

Si el control regresa por medio de esta proposición, en el caso de una subrutina, regresará a la proposición ejecutable que siga de la proposición CALL y en el caso de una función, el programa continuará de manera normal después de haberse ejecutado la función, en la proposición en la que se hizo referencia a la función.

La segunda de las formas es un RETURN no estandar y hace que el control regrese a una proposición etiquetada en el programa que llamó a la subrutina. En el caso de una función, no regresará ningún valor para la referencia a la función.

El RETURN no estandar se indica en un subprograma por medio de un RETURN seguido de una expresión aritmética. El valor final n de ésta se emplea para seleccionar el n-ésimo asterisco en la lista de argu--

mentos de las proposiciones SUBROUTINE o FUNCTION. Si n es mayor que el número de asteriscos que aparecen en la lista, o si es negativo o cero, el programa se parará.

La etiqueta que corresponda al asterisco, la cual aparece precedida por un & en la lista de argumentos reales, se emplea para identificar la proposición a la cual pasará el control. El número de esta etiqueta debe estar en la lista de argumentos reales en la misma posición que ocupa el asterisco en la lista de argumentos mudos.

Si la proposición RETURN aparece en un programa principal se interpretará como una proposición STOP y el programa se parará.

PROPOSICION ENTRY.

Un subprograma de subrutina o de función puede tener una o más proposiciones ENTRY, las cuales permiten que la ejecución comience en un punto que no sea la primera proposición ejecutable del subprograma.

Las formas de esta proposición son :

ENTRY n

y

ENTRY n (lista)

donde n es el nombre del ENTRY y lista es una lista de argumentos-mudos separados por comas.

Un nombre de una proposición ENTRY se construye de la misma manera que un nombre de variable y tiene un tipo sólo si la proposición aparece en un subprograma de función.

La lista de argumentos mudos se construye de la misma manera que la lista de argumentos mudos de una proposición SUBROUTINE.

ENTRY en una subrutina :

Si la proposición ENTRY aparece en el cuerpo de una subrutina, el nombre de aquella se considerará como un nombre de subrutina y se podrá comenzar la ejecución por la primera proposición ejecutable -- después de la proposición ENTRY.

La lista de argumentos de ésta última es independiente de cualquier otra lista de argumentos en la misma unidad de programa.

Si se llega a una subrutina por medio de un ENTRY, se inicializarán solamente los argumentos contenidos en su lista, los demás argumentos que estén en la lista de la proposición SUBROUTINE se harán ceros si son variables sencillas o serán inexistentes para la llamada si son arreglos. Las variables locales se harán iguales a cero o retendrán los valores asignados a ellas de la manera normal por medio de listas con valores iniciales.

ENTRY en una función :

En el caso de que la proposición ENTRY aparezca en un subprograma de función, su nombre será considerado como el de una función. La ejecución comenzará por la primera proposición ejecutable que aparezca después de la proposición ENTRY. La lista de argumentos se construye de la misma manera que la lista de una proposición SUBROUTINE. El valor regresado cuando se emplea una proposición ENTRY en un subprograma de función, es por medio del nombre ENTRY.

En el cuerpo de la función, el nombre de la función y los declarados en las proposiciones ENTRY que haya, se consideran equivalentes. (Véase proposición EQUIVALENCE, más adelante).

EMPLEO DE LA MEMORIA

A continuación se describen algunas proposiciones que sirven para manejar la memoria de la computadora. Estas proposiciones son :

PROPOSICION DIMENSION.

PROPOSICION COMMON.

PROPOSICION EQUIVALENCE.

PROPOSICIONES DE TIPO.

PROPOSICION DIMENSION.

La proposición DIMENSION es no ejecutable y especifica el tamaño y el número de dimensiones de un arreglo de un programa.

La forma de esta proposición es :

DIMENSION a r

donde ar es una lista de declaradores de arreglos separados por comas, de la forma a (i), donde a es el nombre de un arreglo e i es una lista de dimensiones separadas por comas.

Un declarador de un arreglo especifica el número de localidades de memoria que se asignarán a ese arreglo así como el número de subíndices que debe tener un elemento del arreglo. Solamente los arreglos que aparecen en un subprograma como argumentos formales, pueden tener dimensiones variables y estas variables deben ser argumentos mudos o elementos de un bloque COMMON.

Ningún arreglo puede exceder 65535 localidades de memoria.

Ejemplos :

DIMENSION A (20)

DIMENSION C (3, 2, 4)

DIMENSION H (N, N)

PROPOSICION COMMON.

La proposición no ejecutable COMMON asocia variables y arreglos con bloques de almacenamiento que pueden ser compartidos por varias unidades de programa.

La forma de esta proposición es :

COMMON / nom / lv

donde nom es el nombre del COMMON, lv es una lista de variables, nombres de arreglos y/o declaradores de arreglos; los puntos suspensivos indican que son válidas tantas repeticiones /nom/lv como se desee.

Se asocia un nombre simbólico a cada bloque COMMON y cualquier unidad de programa puede tener acceso a este bloque mediante una proposición COMMON que emplee el nombre.

Un nombre de un COMMON se construye de la misma manera que un nombre de variable; este nombre no puede ser un argumento mudo y no puede aparecer en ningún otro lugar que no sea una proposición COMMON.

Un bloque COMMON puede no tener nombre; en este caso el bloque se llama blanco; si el primer nombre que aparece en una proposición COMMON es un blanco se pueden ignorar las diagonales.

Declaradores de arreglos pueden ser empleados en una proposición COMMON para declarar la dimensión del mismo, en la misma manera en la que se puede hacer en las proposiciones de TIPO o en la que se hace en la proposición DIMENSION.

Se asignan localidades contiguas a las variables y arreglos en el orden en el que aparecen en la proposición COMMON.

Se puede asignar localidades a arreglos completos pero no a elementos individuales de un arreglo. Ningún bloque COMMON puede exceder 65535 localidades de memoria.

Si el mismo nombre de un bloque COMMON aparece más de una vez en la misma unidad de programa, los elementos asociados con la segunda aparición se considerarán como extensiones de la lista de la primera aparición.

PROPOSICION EQUIVALENCE.

Esta proposición es no ejecutable y permite que dos o más variables o arreglos que se empleen en una unidad de programa puedan compartir las mismas localidades de memoria.

La forma de la proposición EQUIVALENCE es :

EQUIVALENCE (lv).....

donde lv es una lista de dos o más variables sencillas, elementos de arreglos o nombres de arreglos separados por comas, se pueden tener tantas de estas listas como se desee, cada una incluida entre paréntesis, las listas se separan también por comas.

Si se tienen elementos de arreglos los subíndices deben ser números enteros.

Cada uno de los elementos de una lista contenida entre paréntesis tendrá la misma localidad de memoria; cuando se hacen equivalentes dos arreglos, éstos quedarán alineados ocupando las mismas localidades.

Una misma lista no puede contener dos elementos de un mismo arreglo y no son válidos argumentos mudos.

La proposición EQUIVALENCE debe preceder cualquier proposición -- que emplee alguna de las variables que se hacen equivalentes.

PROPOSICION EXTERNAL.

Para poder emplear un nombre de subprograma de subrutina o de función en una lista de una proposición CALL, es necesario que este -- nombre aparezca primero en una proposición EXTERNAL en la misma unidad de programa donde aparece la proposición CALL.

La forma de esta proposición es :

EXTERNAL l s b

donde `lsb` es una lista de nombres de subrutinas y/o subprograma de función, separados por comas.

Una función de una proposición no puede aparecer en una proposición `CALL`.

La proposición `EXTERNAL` debe de aparecer antes que se haga referencia a la función o subrutina.

PROPOSICION IMPLICIT.

Esta proposición permite que se puedan alterar los tipos que tienen las variables por omisión.

La forma es :

`IMPLICIT t (c)`

donde `t` es un nombre de tipo y `c` es una lista de caracteres iniciales.

Se pueden tener tantas de estas listas como se desee. Sólo se permite una proposición `IMPLICIT` en cada unidad de programa y debe ser la primera proposición en un programa principal y la segunda en un subprograma. La proposición se aplica solamente a nombres simbólicos (de variables o funciones) que aparezcan en esa unidad de programa. Se pueden tener tantas repeticiones de la forma `t (lista)` como se desee, hasta una por cada tipo.

La lista de caracteres iniciales indica que todos los nombres cuyo carácter inicial sea o se encuentre comprendido en el rango especificado

do van a tener el tipo que se asigne en la proposición. Los elementos de la lista pueden ser letras o parejas de letras separadas por un guión; estos elementos se separan por comas. Si el elemento es una letra, todos los nombres que comiencen con esa letra serán del tipo especificado en la proposición; si es una pareja, todos los nombres que comiencen por una letra comprendida en el rango serán de ese tipo (en este caso las dos letras de la pareja pueden ser consecutivas en el alfabeto). El \$ se supone que sigue de la Z.

Ejemplos válidos de la proposición IMPLICIT :

IMPLICIT REAL (K - M)

IMPLICIT LOGICAL (A - E)

En el primer caso, todos los nombres de variables o de funciones que empiecen por una letra comprendida entre K y M, es decir K, L y M serán de tipo real.

En el segundo caso todos los nombres de variables o funciones que comiencen por una letra entre la A y la E serán de tipo lógico.

PROPOSICIONES DE TIPO.

Estas proposiciones permiten especificar directamente el tipo de una variable o función en una unidad de programa. Tales especificaciones tienen preferencia sobre las especificaciones implícitas (esto es, debidas a la letra con la que comienza el nombre de la variable o función). Las formas correctas de una proposición de tipo son :

t m ...

y t m/v/...

donde t es el nombre de un tipo (REAL, INTEGER, LOGICAL, DOUBLE PRECISION o REAL*8, o COMPLEX), m es una lista de variables, nombres de arreglos, funciones, etc., separados por comas; v es una lista de valores iniciales y los puntos indican tantas repeticiones de la forma m/v/ o m como se desee, con cada repetición precedida por una coma.

Ejemplos :

REAL I, J (10)

REAL X, Y, Z/1, 2/

El primer ejemplo declara a la variable I como variable real y a J como un vector de diez elementos. El segundo declara reales las variables X, Y y Z, asignándole un valor inicial de 1 a Y y 2 a Z.

PROPOSICION STOP.

La proposición STOP es ejecutable y permite que termine la ejecución de un programa.

La forma de esta proposición es :

STOP

ó

STOP ve

donde ve es una constante entera de seis caracteres, sin signo.

La ejecución de la proposición STOP provoca la terminación incondicional de un programa y puede aparecer en cualquier lugar del mismo. -

La constante opcional ve se ignora siempre (sirve nada más como control para el programador mismo).

PROPOSICION END

La proposición END no es ejecutable y se emplea como la última proposición de una unidad de programa, la cual puede tener nada más una proposición END.

Si durante la ejecución de un subprograma se encuentra un END, éste se tomará como una proposición RETURN y en el caso de encontrarse durante la ejecución de un programa principal se tomará como un -- STOP. En cualquier caso la ejecución de la unidad de programa no puede continuar al encontrarse una proposición END.

N O T A S

El lenguaje en el que están escritos los programas que se presentan en este trabajo, corresponde al del Sistema UNIVAC 1100, los cuales son compatibles con el del Sistema BURROUGHS 6700 del Centro de Servicios de Cómputo de la UNAM, excepto por lo siguiente :

La especificación de formato libre en el Sistema UNIVAC es un formato sin especificaciones, en vez de una diagonal en las proposiciones de entrada - salida.

Ejemplo :

READ (5, 1) X

1 FORMAT ()

es equivalente en el Sistema BURROUGHS a :

READ (5, /) X

Con este capítulo se espera haber proporcionado una guía rápida del lenguaje FORTRAN, en el cual están hechos todos los programas que se presentan en el resto del trabajo. Para mayor profundidad consúltese el manual de la máquina correspondiente (1).

SECCION I

En los capítulos que siguen, se presenta un programa con la aplicación en computadora de los temas discutidos en el capítulo. Estos programas se pueden correr independientemente, pero se pretende que su aplicación principal sea la de intervenir, como bloques, en la constitución de programas más elaborados, hechos para muy diferentes propósitos.

Con este fin, se ha separado la parte esencial del cálculo en una subrutina y se ha intentado que las subrutinas sean todas compatibles entre sí, inclusive desde el punto de vista de su nomenclatura.

Una de las formas de lograr esto ha sido mediante el empleo de bloques COMMON etiquetados, en los cuales se han almacenado normalmente las variables que no se alteran durante la ejecución de la subrutina, o que se requieren en las demás.

De las subrutinas presentadas en esta primera Sección, sólo dos de ellas poseen un COMMON particular, empleado para almacenar resultados intermedios; sin embargo, todas ellas emplean el bloque PROPS, que se describe a continuación debido a su importancia relativa.

El bloque PROPS, completo, contiene todas las constantes físicas necesarias para la ejecución de cualquier subrutina de esta Sección y consta de 29 variables. Estas variables se han dimensionado para veinte componentes, pero es obvio que esta cifra no se va a alcanzar normal

mente, y es conveniente que el usuario la reduzca según sus necesidades.

Las variables que aparecen en el bloque PROPS son, en orden, las siguientes :

COMP : Identificación del componente. Esta información es alfanumérica y puede servir para la impresión o para modificar el cálculo, como en la subrutina CONVER.

PM : Peso molecular, en lb/lb mol.

TB : Temperatura de ebullición normal, en °R.

TC : Temperatura crítica, en °R.

PC : Presión crítica, en PSIA.

VC : Volumen crítico, en ft³/lb mol.

ZC : Factor de compresibilidad crítico.

W : Factor acéntrico.

KTROL : Identificación de polaridad (1 : compuesto no polar; 2 : polar con puentes de hidrógeno; 3 : polar, sin puentes de hidrógeno).

PCOR : Paracoro.

CS : Constante de Souders multiplicada por el peso molecular.

AG, BG, CG, DG :

Constantes de la capacidad calorífica para el gas.

AL, BL, CL, DL :

Constantes de la capacidad calorífica para el líquido.

CF : Calor de formación del componente en fase gaseosa, a 25°C y 0 atm, en Kcal/g mol.

AKG, BKG, CKG :

Constantes de la conductividad térmica, para el gas.

AKL, BKL, CKL :

Constantes de la conductividad térmica, para el líquido.

M, C : Constantes de la correlación de Othmer para presiones de vapor.

HV 25 : Entalpia de vaporización del componente, a 25°C, en cal/g.

Es claro, también, que este bloque no se va a requerir normalmente en su totalidad, y es por ello que en la mayor parte de esta Sección no se define más que parcialmente.

CAPITULO II

SUBROUTINA B W R S.

El cálculo de la densidad y de la entalpía de componentes puros y de mezclas es de gran importancia en los procesos químicos.

Para poder determinar estas propiedades, es necesario disponer de una ecuación de estado que pueda dar resultados confiables.

La ecuación BWRS, la cual es una modificación de Starling a la ecuación de Benedict-Webb-Rubin (1), es capaz de predecir estas propiedades a temperaturas reducidas tan bajas como 0.3 y densidades reducidas tan altas como 3.0, con error de menos del uno por ciento.

La ecuación de Starling puede predecir las propiedades en la fase líquida tan bien como en la fase vapor y es por esto que se escogió en vez de otras más sencillas.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA Y ANALISIS MATEMATICO.

En general, una ecuación de estado es una función de presión, volumen y temperatura de la forma $f(P, V, T)$ que describe el comportamiento de un gas o de un líquido en una forma explícita o implícita.

Starling (2) propuso una ecuación de once constantes y cuya forma es :

$$\begin{aligned}
 P = & \rho RT + (B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4}) \rho^2 \\
 & + (b RT - a - \frac{d}{T}) \rho^3 + \alpha (a + \frac{d}{T}) \rho^6 \\
 & + \frac{c \rho^3}{T^2} (1 + \gamma \rho^2) \text{EXP}(-\gamma \rho^2) \quad 1)
 \end{aligned}$$

Donde :

$A_0, B_0, C_0, D_0, E_0, a, b, c, d, \alpha$ y γ son las constantes de la ecuación.

P : es la presión en PSIA.

T : es la temperatura, en grados Rankine.

ρ : es la densidad molar en lb-mol/ft³, y

R : es la constante de los gases ($10.73 \frac{\text{PSIA} \cdot \text{ft}^3}{\text{lb-mol} \cdot ^\circ\text{R}}$)

La expresión para la desviación isotérmica de entalpía es :

$$\begin{aligned}
 \phi (H - H^\circ) = & (B_0 RT - 2A_0 - \frac{4C_0}{T^2} + \frac{5D_0}{T^3} - \frac{6E_0}{T^4}) \rho \\
 & + \frac{1}{2} (2b RT - 3a - \frac{4d}{T}) \rho^2 + \frac{1}{5} \alpha (6a + \frac{7d}{T}) \rho^5 \\
 & + \frac{c}{\gamma T^2} [3 - (3 + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 - \gamma^2 \rho^4) \text{EXP}(-\gamma \rho^2)] \quad 2)
 \end{aligned}$$

Donde :

H : es la entalpía real en BTU/(lb-mol), y

H° : es la entalpía ideal (a la misma temperatura pero a presión 0), en BTU/(lb-mol), y

ϕ : es un factor de conversión ($= 5.4 \frac{\text{PSIA} \cdot \text{ft}^3}{\text{BTU}}$)

Las once constantes de la ecuación se pueden calcular como funciones del factor acéntrico (ω), la temperatura crítica (T_c) y del volumen crítico (V_c) (3), de la siguiente manera :

$$\begin{aligned} \frac{B_0}{V_c} &= A_1 + B_1 \omega \\ \frac{A_0}{V_c R T_c} &= A_2 + B_2 \omega \\ \frac{C_0}{V_c R T_c^3} &= A_3 + B_3 \omega \\ \frac{\gamma}{V_c^2} &= A_4 + B_4 \omega \\ \frac{b}{V_c^2} &= A_5 + B_5 \omega \\ \frac{a}{V_c^2 R T_c} &= A_6 + B_6 \omega \\ \frac{a}{V_c^3} &= A_7 + B_7 \omega \\ \frac{c}{V_c^2 R T_c^3} &= A_8 + B_8 \omega \\ \frac{D_0}{V_c R T_c^4} &= A_9 + B_9 \omega \\ \frac{d}{V_c^2 R T_c^2} &= A_{10} + B_{10} \omega \\ \frac{E_0}{V_c R T_c^5} &= A_{11} + B_{11} \omega \cdot \text{EXP} (-3.8 \omega) \quad 3) \end{aligned}$$

Los parámetros A_j y B_j fueron determinados por Starling de un análisis múltiple de propiedades para las primeras parafinas y con ellos - se obtiene una buena aproximación para los parámetros de la ecuación,

sobre todo si el comportamiento del fluido que se trate se asemeja al de las parafinas.

La ecuación de Starling, como todas las existentes hasta la fecha, se desarrolló en base a propiedades de componentes puros, pero puede emplearse para mezclas si se definen éstas como un pseudocomponente puro; las constantes de la ecuación para este pseudocomponente se determinan a partir de las constantes de los componentes puros que componen la mezcla, mediante reglas de mezclado, de entre las cuales las más sencillas son las propuestas por el propio Starling (3) :

$$B_0 = \sum_{i=1}^n x_i B_{0i}$$

$$A_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (A_{0i} A_{0j})^{1/2} \cdot (1 - k_{ij})$$

$$C_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (C_{0i} C_{0j})^{1/2} \cdot (1 - k_{ij})^3$$

$$\gamma = \left[\sum_{i=1}^n x_i \gamma_i^{1/2} \right]^2$$

$$b = \left[\sum_{i=1}^n x_i b_i^{1/3} \right]^3$$

$$a = \left[\sum_{i=1}^n x_i a_i^{1/3} \right]^3$$

$$\alpha = \left[\sum_{i=1}^n x_i \alpha_i^{1/3} \right]^3$$

$$c = \left[\sum_{i=1}^n x_i c_i^{1/3} \right]^3$$

$$D_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (D_{0i} D_{0j})^{1/2} \cdot (1 - k_{ij})^4$$

$$d = \left[\sum_{i=1}^n x_i d_i^{1/3} \right]^3$$

$$E_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (E_{0i} E_{0j})^{1/2} \cdot (1 - k_{ij})^5 \quad 4)$$

En estas ecuaciones :

i y j : son subíndices de las sumatorias y varían de uno al número de componentes de la mezcla (n), y

k_{ij} : es una medida de las desviaciones del comportamiento de la solución ideal para interacciones entre el i -ésimo y el j -ésimo componentes ($k_{ij} = 0$ si la solución es ideal).

Una forma de estimar los parámetros de interacción (4), está dada por la ecuación :

$$k_{ij} = 1 - \frac{8 \sqrt{V_{ci} V_{cj}}}{(V_{ci}^{1/3} + V_{cj}^{1/3})^3}$$

La ecuación de Starling con sus once constantes, calculadas mediante las ecuaciones anteriores, es capaz de predecir la densidad y la desviación de entalpía con una gran exactitud, tanto para componentes -

puros como para mezclas.

METODO DE SOLUCION.

Siendo la ecuación de Starling implícita en la densidad, su solución debe hacerse por ensayo y error. A temperaturas menores de la temperatura crítica, la ecuación puede tener tres o más raíces, de las cuales sólo la menor y mayor tienen significado físico, correspondiendo a la densidad del vapor y del líquido de igual composición, respectivamente.

El cálculo de la densidad por computadora empleado aquí, es el presentado por Johnson y Colver para la BWR (5), esto es, para la fase vapor se emplea una estimación inicial de cero para la densidad, a la cual se le van añadiendo incrementos iguales hasta que la presión calculada exceda la presión real. Cuando esto suceda, se resta a la densidad el último incremento, se divide el incremento entre diez y se continúa con el proceso hasta que la presión calculada y la real coincidan según una tolerancia específica, o bien, el incremento alcance un valor suficientemente pequeño. El procedimiento para la fase líquida es similar, excepto porque el valor inicial se escoge suficientemente grande (ej. 2.5 lb. mol/ft³) y los incrementos son negativos.

El cálculo de la desviación isotérmica de entalpía es directo cuando se conoce la densidad.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina BWRS está organizada en tres partes relativamente independientes entre sí.

La primera parte (subrutina BWRS propiamente) está dedicada a la estimación de los parámetros de la ecuación y de los parámetros de interacción en base a las propiedades críticas de los componentes (hasta un máximo de 20 componentes). Estas estimaciones se consideran adecuadas para fines de diseño. Para una precisión mayor se deben emplear, de ser posible, valores determinados experimentalmente, los cuales se hacen llegar a la subrutina mediante el bloque COMMON / CBWRS /.

Los parámetros de este bloque COMMON son :

- NLG : variable de control :
- = 0 calcula fugacidades (sólo para cálculos de equilibrio líquido-vapor descritos más adelante).
- ≠ 0 no calcula fugacidades.
- NCOMP : Número de componentes de la mezcla.
- BO - EO : Constantes de los componentes puros.
- BOM - EOM : Constantes de la mezcla.
- K : Matriz de parámetros de interacción.

La segunda parte (subrutina DENFUG) puede calcular las constantes de la mezcla en base a los parámetros de los componentes puros, ya

sea estimados o experimentales, según las reglas de mezclado dadas anteriormente, así como la densidad, fase líquida o gas y la fugacidad de cada componente, útil en el cálculo de equilibrio líquido vapor, como se verá más adelante.

Los parámetros que necesita DENFUG son los siguientes :

- X : Vector de fracciones mol de los componentes.
- P : Presión absoluta, PSIA.
- T : Temperatura absoluta, °R.
- NCONT : Variable de control : si es mayor que uno no calcula las constantes de mezclas (se toman las de alguna llamada anterior), a menos que NLG sea igual a cero.
- LG : Variable de control : si es igual a uno se hace el cálculo para la fase líquida; si es igual a dos, se hace el cálculo para la fase gaseosa.

La subrutina regresará al programa que la llame :

- D : Densidad molar de la mezcla, en lb-mol/ft³, y
- F : Vector de los logaritmos de las fugacidades.

La tolerancia entre la presión calculada y la presión real en el cálculo de la densidad es de una milésima y para el incremento en la densidad es de una millonésima.

La tercera parte (subrutina ENT) calcula las desviaciones isotérmicas de entalpía (y de entropía).

Los parámetros que requiere esta subrutina son :

T : Temperatura absoluta, en °R.

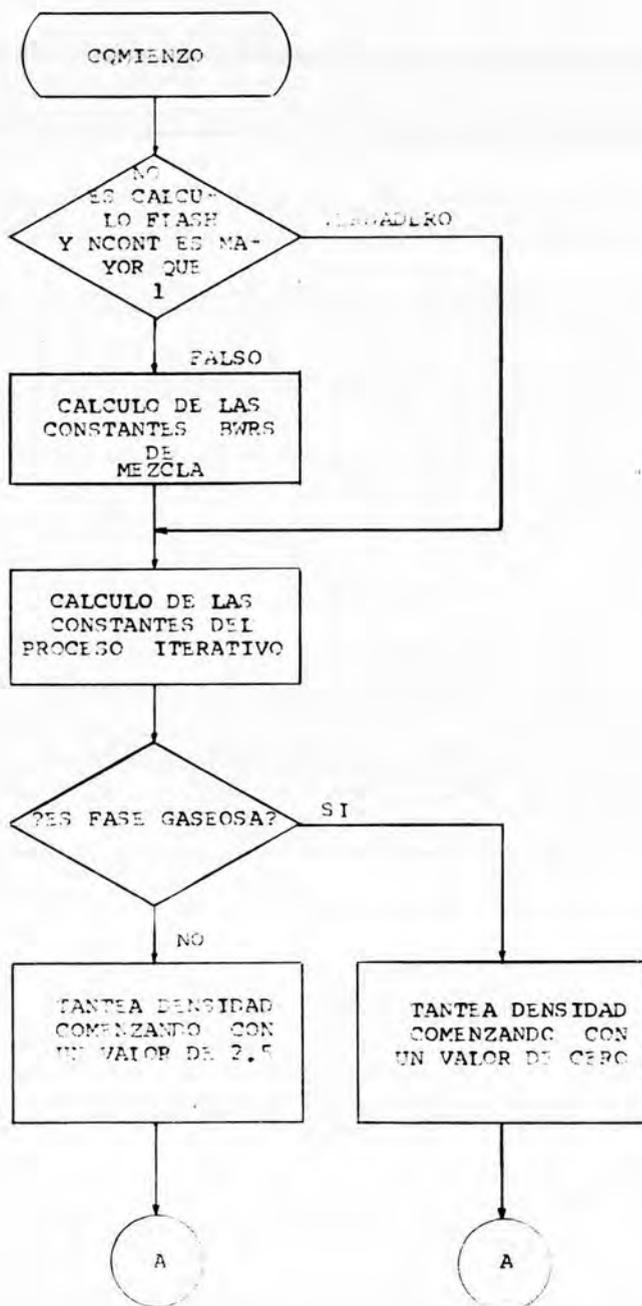
D : Densidad molar, en lb-mol/ft³.

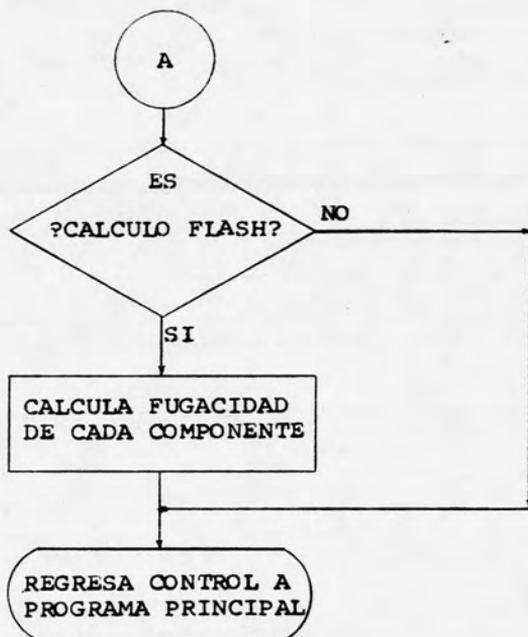
y regresa al programa que la llame :

DIH : Desviación isotérmica de entalpia, en BTU/lb-mol.

DIS : Desviación isotérmica de entropia, en BTU/lb-mol-°R.

CALCULO DE DENSIDADES Y FUGACIDADES
POR LA ECUACION BWRS
(SUBROUTINA DELFUG)





NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA BWRS.

BO, AO, CO,	:	
GAMA, BI, AI,	:	Vectores de parámetros de la ecuación BWRS,
ALFA, CI, DO,	:	componentes puros.
DI, EO	:	
BOM, AOM,	:	
COM, GAMAM,	:	
BIM, AIM,	:	Parámetros de mezcla.
ALFAM, CIM,	:	
DOM, DIM, EOM :		
A, B	:	Vectores de constantes para la estimación de los parámetros de la ecuación.
CK	:	Variable auxiliar.
COMP	:	Identificación de los componentes.
COR	:	Incremento de la densidad en cada iteración.
CT	:	Variable auxiliar.
DIF	:	Diferencia entre la presión calculada y la real.
K	:	Matriz de parámetros de interacción.
NCOMP	:	Número de componentes.
NLG	:	Variable de control :
		NLG = 0 : esta llamada es parte de un cálculo de equilibrio.

NLG = 1 : Cálculo en fase líquida.

NLG = 2 : Cálculo en fase vapor.

- PCALC : Presión calculada.
- R : Constante de los gases.
- RTLNF : Logaritmo natural de la fugacidad, multiplicado por RT.
- RO - R 7 : Variables auxiliares.
- SIGMA : Variable auxiliar.
- TC : Temperatura crítica, °R.
- VC : Volumen crítico, ft³/lb mol.
- W : Factor acéntrico.
- X 2 : Variable auxiliar.

EJEMPLO DE CALCULO.

Como ejemplo de cálculo se escogieron dos mezclas para las cuales se tienen datos experimentales de densidad y desviación isotérmica de entalpia.

La primera está formada por 40 % en mol de metano y 60 % en mol de propano y se corrió para 158.2 y 458.2°F, variando la presión de 200 a 2 000 PSIA. La comparación de los resultados (páginas siguientes) con los datos experimentales y con los resultados de la ecuación BWR^o (5) da un error promedio de un 2 % (máximo 3.8 %) para el cálculo de la densidad.

La segunda mezcla consta de 72 % en mol de metano y 28 % en mol de propano. La temperatura se hizo variar de 100°F a -250°F, de 50 en 50 grados, a una presión de 1 500 PSIA.

La comparación con los datos experimentales, con la ecuación BWR y la correlación de Yen & Alexander en sus respectivos rangos, da un error promedio de 3 % (máximo 5 %) para cálculo de desviación isotérmica de entalpia.

Estos errores pueden parecer muy grandes si no se tiene en cuenta que para los once parámetros de la ecuación y los coeficientes de interacción no se tomaron los valores óptimos o experimentales, sino los obtenidos mediante regresiones (3), (4). Para fines de diseño y simulación se puede considerar esta precisión como satisfactoria.

ES*RIJULQ(1).BWRMAIN

```

1      1 FORMAT ( )
2      2 FORMAT ('1',26X,14A5,/)
3      3 FORMAT (26X,'PRESION',7X,'TEMPERATURA',8X,'DENSIDAD',9X,'DESV. ENT
4      -L.',9X,'DESV. ENTR.',/,27X,'(PSIA)',9X,'(G. F.)',7X,'(LB MOL/CU FT
5      -)',5X,'(BTU/LR MOL)',5X,'(BTU/LB MOL G. F.)',/)
6      4 FORMAT (F33.2,F16.2,F17.4,F20.3,F19.3)
7      5 FORMAT (3I2,14A5)
8      6 FORMAT (2A6,13X,F6.2,6X,F5.2,5X,F5.3)
9      7 FORMAT (61X,'D A T O S :',//40X,'COMPONENTE',6X,'F. MOL',4X,'T. CR
10     -.',4X,'V. CR.',4X,'F. AC.',//,66X,'(G.R.) (CUFT/LBMOL)',//,(41X,2
11     -A6,F9.4,2F10.2,F10.3,/)
12     DIMENSION TITULO(14),Z(20),F(20),PA(10),TF(10)
13     COMMON /CBWRS/ NLG, NCOMP
14     COMMON /PROPS/ COMP(2,20),PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20
15     -),W(20)
16     8 READ (5,5,END=11) NLG, NCOMP, NCOND, TITULO
17     DO 9 I=1,NCOMP
18     9 READ(5,6)COMP(1,I),COMP(2,I),TC(I),VC(I),W(I)
19     READ 1, (Z(I), I=1,NCOMP), (PA(I), TF(I), I=1, NCOND)
20     PRINT 2, TITULO
21     WRITE(6,7) (COMP(1,I),COMP(2,I),Z(I),TC(I),VC(I),W(I),I=1,NCOMP)
22     PRINT 2, TITULO
23     CALL BWR5
24     WRITE(6,3)
25     DO 10 NCONT=1,NCOND
26     P=PA(NCONT)
27     T=TF(NCONT)+459.69
28     CALL DENFUG(Z,P,T,D,F,NCONT,NLG)
29     CALL ENT(T,D,DIH,DIS)
30     10 WRITE(6,4) PA(NCONT),TF(NCONT),D,DIH,DIS
31     GO TO 8
32     11 STOP
33     END

```

ES*TPFS(0).BWR5

```

1  SUBROUTINE BWR5
2  DIMENSION X(20), F(20), A(11), B(11)
3  REAL K
4  COMMON /CBWR5/NLG, NCOMP, B0(20), A0(20), C0(20), GAMA(20), B1(20), A1(20)
5  -, ALFA(20), C1(20), D0(20), D1(20), E0(20), B0M, A0M, C0M, GAMA M, B1M, A1M, A
6  -LFAM, C1M, D0M, D1M, E0M, K(20,20)
7  COMMON /PROPS/ COMP(2,20), PM(20), TB(20), TC(20), PC(20), VC(20), ZC(20)
8  -, W(20)
9  DATA A/0.443690,1.28438,0.356306,0.544979,0.529629,0.484011,0.0705
10 -233,0.504087,0.0307452,0.0732828,0.006450/, B/0.115449,-0.920731,1
11 -.70871,-0.270896,0.349261,0.754130,-0.044448,1.32245,0.179433,0.46
12 -3492,-0.022143/, R/10.7315/
13  F3(A,B)=(A*A*B)**0.33333333
14  IF (NCOMP .LT. 2) GO TO 6
15  DO 5 I=2, NCOMP
16  L=I-1
17  DO 5 J=I, NCOMP
18  K(L,J)=1.-8.*SQRT(VC(L)*VC(J))/(VC(L)**.333333+VC(J)**.333333)**3
19  K(J,L)=K(L,J)
20  DO 7 I=1, NCOMP
21  B0(I)=(A(1)+B(1)*W(I))*VC(I)
22  A0(I)=(A(2)+B(2)*W(I))*R*TC(I)*VC(I)
23  C0(I)=(A(3)+B(3)*W(I))*R*TC(I)**3*VC(I)
24  GAMA(I)=(A(4)+B(4)*W(I))*VC(I)**2
25  B1(I)=(A(5)+B(5)*W(I))*VC(I)**2
26  A1(I)=(A(6)+B(6)*W(I))*R*TC(I)*VC(I)**2
27  C1(I)=(A(7)+B(7)*W(I))*VC(I)**3
28  D0(I)=(A(8)+B(8)*W(I))*R*TC(I)**3*VC(I)**2
29  D1(I)=(A(9)+B(9)*W(I))*R*TC(I)**4*VC(I)
30  E0(I)=(A(10)+B(10)*W(I))*R*TC(I)**2*VC(I)**2
31  E1(I)=(A(11)+B(11)*W(I))*EXP(-3.*B*W(I))*R*TC(I)**5*VC(I)
32  RETURN
33  ENTRY DENFUG (X, P, T, D, F, NCONT, LG)
34  IF (NLG.GT.0 .AND. NCONT.GT.1) GO TO 10
35  B0M=0.0
36  A0M=0.0
37  C0M=0.0
38  GAMA M=0.0
39  B1M=0.0
40  A1M=0.0
41  ALFAM=0.0
42  C1M=0.0
43  D0M=0.0
44  D1M=0.0
45  E0M=0.0
46  DO 9 I=1, NCOMP
47  IF (X(I) .LE. 0.) GO TO 9
48  B0M=B0M+X(I)*B0(I)
49  GAMA M=GAMA M+X(I)*SQRT(GAMA(I))
50  B1M=B1M+X(I)*B1(I)**0.33333333
51  A1M=A1M+X(I)*A1(I)**0.33333333
52  ALFAM=ALFAM+X(I)*ALFA(I)**0.33333333
53  C1M=C1M+X(I)*C1(I)**0.33333333
54  D1M=D1M+X(I)*D1(I)**0.33333333
55  DO 8 J=1, NCOMP
56  IF (X(J) .LE. 0.) GO TO 8
57  X2=X(I)*X(J)
58  CK=1.0-CK(I,J)
59  A0M=A0M+X2*SQRT(A0(I)*A0(J))*CK
60  C0M=C0M+X2*SQRT(C0(I)*C0(J))*CK**3

```

```

61      DOM=D0M+X2*SQR(T(D0(I)*D0(J))*CK**4
62      E0M=E0M+X2*SQR(T(E0(I)*E0(J))*CK**5
63      8 CONTINUE
64      9 CONTINUE
65      B1M=B1M*B1M*B1M
66      A1M=A1M*A1M*A1M
67      C1M=C1M*C1M*C1M
68      D1M=D1M*D1M*D1M
69      GAMAM=GAMAM*GAMAM
70      ALFAM=ALFAM*ALFAM*ALFAM
71      10 R0=R*T
72      R1=((-E0M/T+D0M)/T-CUM)/(T*T)+B0M*R0-A0M
73      R2=D1M/T+A1M
74      R3=B1M*R0-R2
75      R4=ALFAM*R2
76      R5=C1M/(T*T)
77      IF (LG .EQ. 2) GO TO 15
78      COR=.05
79      D=2.5
80      11 R6=EXP(-GAMAM*D*D)*R5
81      PCALC = (((R4*D + GAMAM*R6)*D*D + R6 + R3)*D + R1)*D + R0)*D
82      DIF=PCALC-P
83      IF (ABS(DIF).LT.1E-3 .OR. COR.LE.1E-6) GO TO 14
84      IF (DIF) 13,14,12
85      12 D=D-COR
86      GO TO 11
87      13 COR=0.1*COR
88      D=D+9.0*COR
89      GO TO 11
90      14 IF (NLG .GT. 0) RETURN
91      GO TO 20
92      15 COR = AMIN1(.1*P/R0, .01)
93      D = COR
94      16 R6=EXP(-GAMAM*D*D)*R5
95      PCALC = (((R4*D + GAMAM*R6)*D*D + R6 + R3)*D + R1)*D + R0)*D
96      DIF=P-PCALC
97      IF (ABS(DIF).LT.1E-3 .OR. COR.LE.1E-6) GO TO 19
98      IF (DIF) 18,19,17
99      17 D=D+COR
100     GO TO 16
101     18 COR=0.1*COR
102     D=D-9.0*COR
103     GO TO 16
104     19 IF (NLG .GT. 0) RETURN
105     20 R6 = R6/R5
106     IF (NCOMP .EQ. 1) GO TO 23
107     R7 = (((0.5*GAMAM*D*D + 1.0)*GAMAM*D*D + 1.0)*(-R6) + 1.0)*2.0*R5/GA
108     -MAM
109     R6=((1.0-R6)/(GAMAM*D*D)-0.5*R6)*3.0*D*D/(T*T)
110     DO 22 I=1, NCOMP
111     IF (X(I) .LE. 0.) GO TO 22
112     SIGMA=0.0
113     DO 21 J=1, NCOMP
114     IF (X(J) .LE. 0.) GO TO 21
115     CK=1.0-K(I,J)
116     CT=CK/T
117     SIGMA = (((-SQR(T(E0(I)*E0(J))*CT+SQR(T(D0(I)*D0(J))*CT-SQR(T(C0(I)
118     -*C0(J))*CT*CT-SQR(T(A0(I)*A0(J))*CK*X(J) + SIGMA
119     21 CONTINUE
120     SIGMA=2.0*D*SIGMA
121     F(I) = (((F3(D1M,D1(I))/T+F3(A1M,A1(I)))*ALFAM + F3(ALFAM,ALFA(I)

```

```

122      -)*R2)*D*D*D*0.6 + (F3(B1M,B1(I))*R0-F3(A1M,A1(T))-F3(D1M,D1(I))/T)
123      -*1.5)*D + (B0M + B0(I))*R0)*D + F3(C1M,C1(I))*R6-R7*SQRT(GAMA(I)/G
124      -AMAM) + SIGMA)/RU + ALOG(X(I)*D*R0)
125  22 CONTINUE
126      RETURN
127  23 RTLNF = (( 1.2*R4*D*D*D + 1.5*R3)*D + 2.0*R1)*D + ALOG(D*R0)*R0 +
128      -(((GAMAM*D*D+0.5)*GAMAM*D*D-1.0)*EXP(-GAMAM*D*D)+1.0)*R5/GAMAM
129      F(1) = RTLNF/R0
130      RETURN
131      ENTRY ENT (T, D, DIH, DIS)
132      DIH = (((1.4*D1M/T+1.2*A1M)*ALFAM*D*D*D+R*B1M*T-1.5*A1M-2.0*D1M/T)
133      -*D+((-6.0*E0M/T+5.0*D0M)/T-4.0*C0M)/(T*T)-2.0*A0M+R*B0M*T)*D+(((GA
134      -MAM*D*D-0.5)*GAMAM*D*D-3.0)*EXP(-GAMAM*D*D)+3.0)*C1M/(GAMAM*T*T)
135      DIH = .185174*DIH
136      DIS = ((ALFAM*D1M*D*D*D/(5.*T*T)-.5*(R*B1M+D1M/(T*T)))*D-((4.*E0M/
137      -T-3.*D0M)/T+2.*C0M)/(T*T*T)-R*B0M)*D-R*ALOG(R*D*T/14.696)+((-1.0-
138      -5*GAMAM*D*D)*EXP(-GAMAM*D*D)+1.0)*2.0*C1M/(GAMAM*T**3)
139      DIS = .185174*DIS
140      RETURN
141      END

```

EJEMPLO DE CALCULO DE DENSIDAD

D A T O S :

COMPONENTE	F. MOL	T. CR. (G.R.)	V. CR. (CUFT/LBMOL)	F. AC.
METANO	.4000	343.30	1.59	.013
PROPANO	.6000	665.80	3.20	.152

EJEMPLO DE CALCULO DE DENSIDAD

PRESION (PSIA)	TEMPERATURA (G. F.)	DENSIDAD (LB MOL/CU FT)	DESV. ENTL. (BTU/LB MOL)	DESV. ENTR. (BTU/LB MOL G. F.)
200.00	158.20	.0327	-316.130	-10.890
500.00	158.20	.1213	-1097.847	-14.018
1000.00	158.20	.2730	-2184.480	-16.441
1500.00	158.20	.4715	-3206.957	-18.500
2000.00	158.20	.5839	-3664.258	-19.522
200.00	458.20	.0207	-133.959	-10.639
500.00	458.20	.0640	-403.763	-13.048
1000.00	458.20	.1095	-670.152	-14.292
1500.00	458.20	.1676	-985.287	-15.374

EJEMPLO DE CALCULO DE DESVIACION DE ENTALPIA

D A T O S :

COMPONENTE	F. MOL	T. CR. (G.R.)	V. CR. (CUFT/LBMOL)	F. AC.
METANO	.7200	343.30	1.59	.013
PROPANO	.2800	665.80	3.20	.152

EJEMPLO DE CÁLCULO DE DESVIACION DE ENTALPIA

PRESION (PSIA)	TEMPERATURA (G. F.)	DENSIDAD (LB MOL/CU FT)	DESV. ENTL. (BTU/LB MOL)	DESV. ENTR. (BTU/LB MOL G. F.)
1500.00	100.00	.3806	-1701.408	-16.809
1500.00	50.00	.5364	-2335.447	-18.000
1500.00	-0.04	.8188	-3250.120	-19.891
1500.00	-50.00	1.0277	-3886.244	-21.347
1500.00	-100.00	1.1576	-4278.008	-22.364
1500.00	-150.00	1.2620	-4601.828	-23.332
1500.00	-200.00	1.3593	-4942.802	-24.536
1500.00	-250.00	1.4619	-5434.411	-26.660

CAPITULO III

SUBROUTINA VISC.

Una gran parte de los cálculos en ingeniería química involucran a la viscosidad. La viscosidad es una medida de la fricción interna del fluido y se define como la relación del esfuerzo cortante por unidad de área al gradiente de velocidad en un punto; por consiguiente deberá tener dimensiones de fuerza por tiempo sobre longitud cuadrada o bien masa sobre longitud por tiempo. En la mayoría de los casos, se expresa en centipoises (.01 g/cm-seg).

VISCOSIDAD DE GASES :

La ecuación de viscosidad, como se determina de una solución rigurosa del modelo de esfera rígida que no interacciona, es :

$$\mu = 0.002669 \sqrt{MT} / \sigma^2 \quad (1)$$

donde :

- μ = es la viscosidad en centipoises.
- M = es el peso molecular.
- T = es la temperatura, en grados Kelvin.
- σ = es el diámetro de la esfera rígida en Å

Si las moléculas interaccionan se debe incluir otro término que tome en cuenta estas interacciones.

Según el tratamiento de Chapman-Enskog, la ecuación se transforma en :

$$\mu = 0.002669 \sqrt{MT} / \Omega \sigma^2 \quad (2)$$

donde Ω es conocida como la integral de colisión y es una función tabulada del parámetro KT/ϵ_0 donde K es la constante de Boltzman, T es la temperatura absoluta y ϵ_0 es la energía mínima de atracción.

Estos parámetros pueden calcularse por medio de las ecuaciones siguientes :

$$\epsilon_0/K = 65 \cdot 3 \cdot T_C \cdot Z_C^{18/5} \quad ^\circ K$$

$$\sigma = 0.1866 \cdot V_C^{1/3} \cdot Z_C^{-6/5} \quad \text{Å}$$

$$\sigma = 0.812 \cdot (T_C/P_C)^{1/3} \cdot Z_C^{-13/15} \quad \text{Å}$$

$$1/\Omega = 0.697 \cdot (1.0 + 0.323 \cdot \ln(KT/\epsilon_0))$$

La ecuación (2) se ha modificado de manera de poder tener una expresión de la viscosidad en función de las condiciones críticas. Bromley y Wilke sustituyeron a ϵ_0/K por $0.75 \times T_C$ y σ por $5/6 V_C^{1/3}$, para gases no polares; se obtiene entonces la ecuación :

$$\mu = 0.00333 \times (M \times T_C)^{1/2} \times f(1.33 \times Tr) / V_C^{2/3} \quad (3)$$

donde :

μ = es la viscosidad de un gas no polar, en centipoises.

M = es el peso molecular.

T_C = es la temperatura crítica en $^\circ K$

V_C = es el volumen crítico en $\text{cm}^3/\text{g mol}$.

Tr = es la temperatura reducida.

$f(1.33 \times Tr)$ = es una función para obtener KT/ϵ_0 ; esta fun-

ción existe tabulada.

La ecuación anterior se ha aplicado tanto a gases polares como a no polares y se han obtenido buenos resultados (errores menores al 5%).

Si se sustituye : V_C por $\frac{Z_C R T_C}{P_C}$ se tiene que :

$$\begin{aligned} \mu \times V_C^{2/3} / (M \times T_C)^{1/2} &= \mu \times (R T_C)^{2/3} / ((M \times T_C)^{1/2} \times (P_C / Z_C)^{2/3}) \\ &= \mu \times R^{2/3} \times T_C^{1/6} / (M^{1/2} \times P_C^{2/3}) \times Z_C^{2/3} \end{aligned} \quad (4)$$

y por lo tanto la viscosidad es igual a una función de la temperatura - reducida (ya que es función de la temperatura a la que se trabaje).

Este tipo de correlación fue la base para obtener ecuaciones para la viscosidad de gases, tanto polares como no polares, en función de la temperatura.

Finalmente se llegó a las ecuaciones siguientes (para gases a baja presión).

Para gases polares :

$$\mu \xi = 34.0 \times 10^{-5} \times Tr^{0.94} \quad \text{si } Tr < 1.5 \quad (5)$$

$$\mu \xi = 17.78 \times 10^{-5} \times (4.58 \times Tr - 1.67)^{5/8} \quad \text{si } Tr > 1.5 \quad (6)$$

Para gases polares con enlaces de hidrógeno y si $Tr < 2.0$:

$$\mu \xi = (7.55 \times Tr - 0.55) \times 10^{-5} \times Z_C^{-5/6} \quad (7)$$

Para gases polares sin enlaces de hidrógeno y si $Tr < 2.5$:

$$\mu \xi = (1.90 \times Tr - 0.29) \times 10^{-4} \times Z_c^{-2/3} \quad (8)$$

donde :

μ = es la viscosidad, en centipoises.

Tr = es la temperatura reducida.

Z_c = es el factor de compresibilidad crítico.

$$\xi = T_c^{1/6} / M^{1/2} P_c^{2/3}$$

VISCOSIDAD DE MEZCLAS GASEOSAS.

Las expresiones para la viscosidad de mezclas gaseosas son bastante complicadas y se basan en una extensión de teoría cinética. En el desarrollo de la ecuación para viscosidades de mezclas de gases a baja presión, se consideraron términos de corrección y el resultado de la teoría cinética es :

$$\mu_m = \sum_{i=1}^n \mu_i / \left[1 + \sum_{j=1}^n \theta_{ij} (y_j/y_i) \right] \quad (9)$$

donde :

$$\theta_{ij} = 6/5 A_{ij} \cdot (RT/PM_i) (\mu_i/D_{ij}) \quad (10)$$

y donde :

$$A_{ij} = \Omega_{v_{ij}} / \Omega_{D_{ij}}$$

$\Omega_{v_{ij}}$ = es la integral de colisión para una mezcla de componentes de i y j, para la viscosidad.

$\Omega_{D_{ij}}$ = es la integral de colisión para difusión para una mezcla de i y j.

R = es la constante de los gases.

T = es la temperatura en °K.

P = es la presión en atmósferas.

M_i = es el peso molecular del componente i.

Para calcular las integrales de colisión ij es necesario tener valores de la energía de atracción ϵ_{oij} , los cuales se pueden calcular mediante la ecuación :

$$\epsilon_{oij} = \sqrt{\epsilon_{oi} \cdot \epsilon_{oj}}$$

Mediante datos experimentales se mostró que el grupo $6/5 \cdot A_{ij}$ era prácticamente igual a 1.385 y de esta manera se puede llegar a una aproximación para ρ_{ij} :

$$\rho_{ij} = 1.385 \cdot (\mu_i / \rho_i \cdot D_{ij}) \quad (11)$$

Wilke obtuvo el siguiente resultado :

$$\rho_{ij} = [1.0 + (\mu_i / \mu_j)^{1/2} \cdot (M_j / M_i)^{1/4}]^2 / \{ \sqrt{8} \cdot [1 + (M_i / M_j)^{1/2}] \} \quad (12)$$

Esta expresión de ρ es la más conocida y con la cual se pueden obtener los mejores resultados en el cálculo de la viscosidad de una mezcla gaseosa.

VISCOSIDAD DE LIQUIDOS.

El cálculo de la viscosidad de un líquido es bastante más difícil que el de un gas a baja presión, debido a que en el líquido existen cam--

pos de interacción entre las moléculas, las cuales forman grupos -- compactos; por lo tanto no existe ninguna teoría simple que permita un cálculo fácil y las técnicas empleadas son todas empíricas, basadas en la estructura o en las propiedades físicas del compuesto. Uno de estos métodos es el de Souders y sirve para el cálculo de la viscosidad de un compuesto a una temperatura menor a su punto de ebullición normal. Este método se basa en la relación empírica :

$$\log (\log 10 \mu_L) = m \rho_L - 2.9 \quad (13)$$

Donde :

μ_L = es la viscosidad del compuesto, en cp.

ρ_L = es la densidad en g/cm³.

m = es una constante igual a CS/PM, donde CS es la --- constante de viscosidad calculada de constantes atómicas y estructurales (más adelante aparece una tabla de estas últimas constantes, así como una tabla de valores de la constante CS para varios compues-- tos) y PM es el peso molecular del compuesto.

En el caso de líquidos saturados a una temperatura entre T_b y T_c -- uno de los métodos que dan mejores resultados es el de Stiel y Thodos. Este método se basa en relaciones de estados correspondientes -- para gases densos, las cuales se pueden emplear en la fase líquida si no se exceden los límites de densidad fijados. Las ecuaciones son las siguientes :

Para compuestos no polares :

$$\begin{aligned} \left[(\mu - \mu^\circ) \cdot \xi + 10^{-4} \right]^{0.25} &= 0.10230 + 0.023364 \cdot \rho_r \\ &+ 0.058533 \cdot \rho_r^2 - 0.040758 \cdot \rho_r^3 \\ &+ 0.0093324 \cdot \rho_r^4 \end{aligned} \quad (14)$$

Donde :

μ = es la viscosidad del compuesto.

μ° = es la viscosidad del compuesto a baja presión y a la misma temperatura. Esta viscosidad está dada por las ecuaciones (5) a (8) anteriores.

ρ_r = es la densidad reducida.

ξ = es igual a $T_c^{1/6} / M^{1/2} \cdot P_c^{2/3}$

Para compuestos polares :

$$\begin{aligned} (\mu - \mu^\circ) \cdot \xi &= 16.56 \cdot 10^{-5} \cdot \rho_r^{1.111} \\ &\text{si } \rho_r \leq 0.1 \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} (\mu - \mu^\circ) \cdot \xi &= 0.607 \cdot 10^{-5} \cdot (9.045 \cdot \rho_r + 0.63)^{1.739} \\ &\text{si } 0.1 < \rho_r \leq 0.9 \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \log \left[-\log (\mu - \mu^\circ) \cdot \xi \right] &= 0.6439 - 0.1005 \cdot \rho_r \\ &\text{si } 0.9 < \rho_r \leq 2.2 \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \log \left[-\log (\mu - \mu^\circ) \cdot \xi \right] &= 0.6439 - 0.1005 \cdot \rho_r - 4.75 \cdot 10^{-4} \cdot \\ &(\rho_r^3 - 10.65)^2 \\ &\text{si } 2.2 < \rho_r \leq 2.6 \end{aligned} \quad (18)$$

$$(\mu - \mu^\circ) \cdot \xi = 0.009 \quad \text{si } \rho_r = 2.8 \quad (19)$$

$$(\mu - \mu^\circ) \cdot \xi = 0.025 \quad \text{si } \rho_r = 3.0 \quad (20)$$

VISCOSIDAD DE MEZCLAS LIQUIDAS.

Existe un gran número de correlaciones para calcular la viscosidad de mezclas de líquidos, pero la mayoría requieren de cuando menos un dato experimental. Si no se tiene ningún dato experimental se puede emplear la regla :

$$f(\mu_m)_L = \sum_{i=1}^n x_i \cdot f(\mu_i)_L \quad (21)$$

donde :

x_i = es la fracción mol de cada componente y

$f(\mu)_L$ puede ser :

$$\begin{aligned} & \mu_L \\ & 1/\mu_L \\ & \text{ó } \ln \mu_L \end{aligned}$$

En muchos casos se pueden obtener buenos resultados con esta ecuación pero hay casos en los que falla.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina VISC calcula la viscosidad de componentes puros y de mezclas empleando las ecuaciones descritas anteriormente. Primero analiza si el fluido es gas o líquido; si es éste último compara la temperatura de trabajo con el punto de ebullición normal de cada uno de los componentes de la mezcla.

Después VISC calculará la viscosidad de todos los componentes de la mezcla y finalmente calculará la viscosidad de la mezcla.

La subrutina VISC requiere de los siguientes argumentos para hacer el cálculo :

- NCOMP : Número de componentes de la mezcla.
- Z : Vector que guarda la composición de la mezcla.
- KTROL : Vector que guarda los tipos de los componentes :
 - 1 : componente no polar.
 - 2 : componente polar con enlaces de hidrógeno.
 - 3 : componente polar sin enlaces de hidrógeno.
- T : Temperatura de trabajo.
- NLG : Tipo de fluido :
 - 1 : líquido.
 - 2 : gas.

y regresará al programa principal :

MU : Vector que guarda las viscosidades de los componentes de la mezcla.

MULG : Viscosidad de la mezcla.

VISC tiene también el bloque COMMON PROPS ya que requiere de la temperatura crítica, de la presión crítica, del factor de compresibilidad crítico, del volumen crítico, del peso molecular, de la temperatura de ebullición normal y de la constante de Souders de cada componente de la mezcla. (Se manda CS multiplicada por el peso molecular).

Se emplea otro bloque COMMON llamado CVISC para las densidades de los componentes a las condiciones de operación, en el caso de que la mezcla sea líquida.

En el caso de que la densidad reducida de la mezcla sea mayor de 3, VISC imprimirá un mensaje para indicarlo y continuará el cálculo hasta obtener un resultado. Sin embargo, éste será muy aproximado ya que la densidad reducida estará fuera de rango.

CONSTANTES ATOMICA Y ESTRUCTURAL DE SOUDERS.

CH ₂	55.6	OH	57.1	N	37
H	2.7	COO	90	Cl	60
C	50.2	COOH	104.4	Br	79
O	29.7	NO ₂	80	I	110

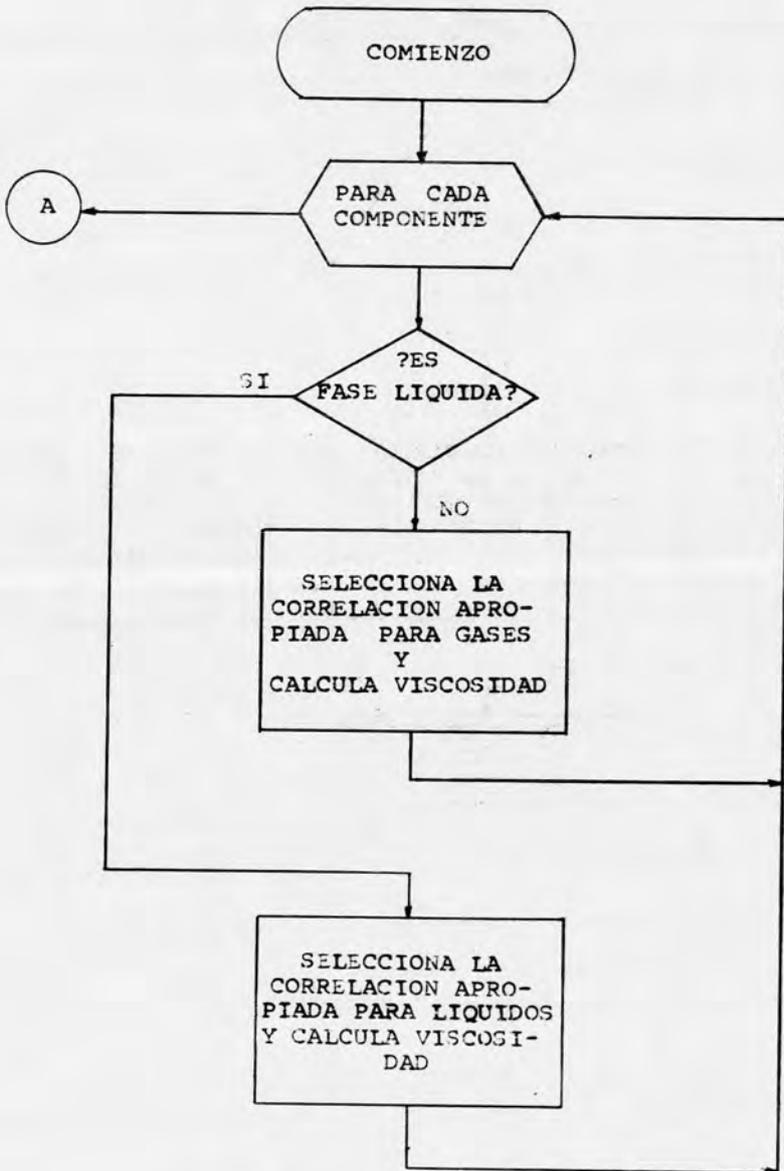
Enlace doble	-15.5	$ \begin{array}{c} R \quad R \\ \diagdown \quad / \\ CHCH \\ / \quad \diagdown \\ R \quad R \end{array} $	+ 8	-CH-CHCH ₂ X	+ 4
Anillo de 5-C	-24				
Anillo de 6-C	-21				
Grupo lateral sobre el anillo de 6-C		$ \begin{array}{c} R \\ \\ R-C-R \\ \\ R \end{array} $	+13	$ \begin{array}{c} R \\ \diagdown \\ CHX \\ / \\ R \end{array} $	+ 6
Peso molecular menor que 17	- 9	H-C-R	+10		
Peso molecular mayor que 16	-17	$ \begin{array}{c} O \\ \\ H-C-R \end{array} $			
Orto y para	+ 3	CH ₃ -C-R	+ 5		
Meta	+ 1	$ \begin{array}{c} O \\ \\ CH_3-C-R \end{array} $			

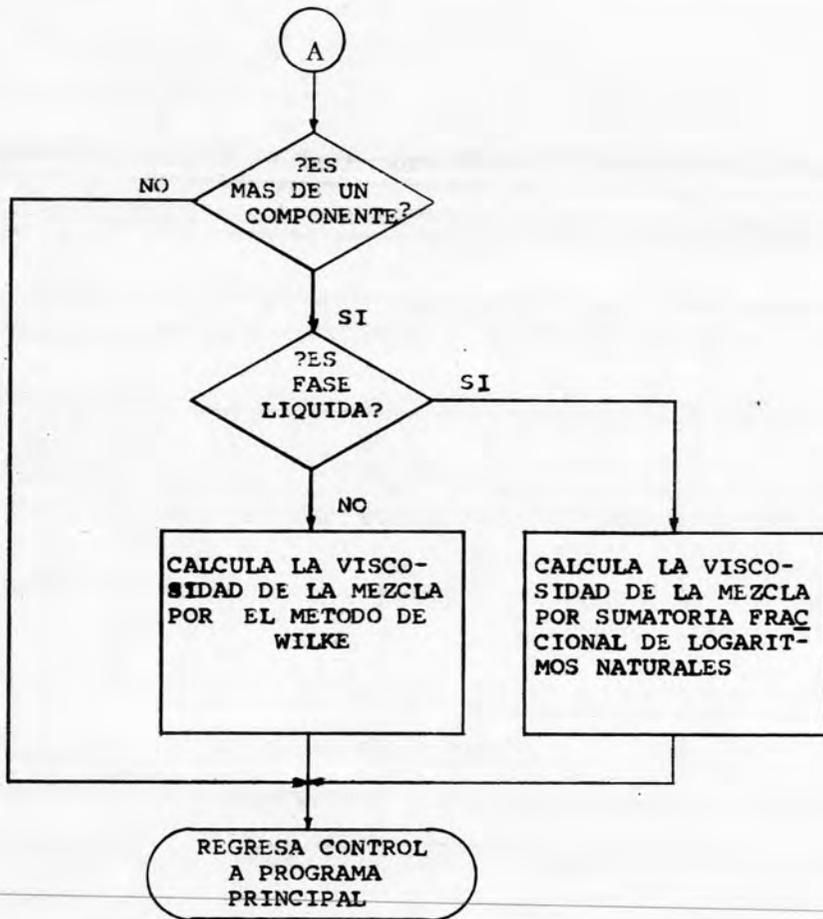
LISTA DE CONSTANTES DE SOUDERS PARA
VARIOS COMPUESTOS.

COMPUESTO	CONSTANTE DE SOUDERS ·PM
METANO	61.0
ETANO	116.6
PROPANO	172.2
n - BUTANO	227.8
i - BUTANO	227.8
n - PENTANO	283.4
i - PENTANO	283.4
neo - PENTANO	296.4
n - HEXANO	339.0
i - HEXANO	339.0
3 - METIL - PENTANO	339.0
2 - 2 - DIMETIL - BUTANO	352.0
n - HEPTANO	394.6
n - OCTANO	450.2
n - NONANO	505.8
n - DECANO	561.4
n - UNDECANO	617.0
n - DODECANO	672.6
n - TRIDECANO	728.6
n - TETRADECANO	783.8

n - PENTADECANO	839.4
n - HEXADECANO	895.0
ETILENO	95.7
PROPILENO	151.3
1 - BUTENO	206.9
CIS - 2 - BUTENO	206.9
TRANS - 2 - BUTENO	206.9
i - BUTENO	206.9
1 - PENTENO	262.5
CIS - 2 - PENTENO	262.5
TRANS - 2 - PENTENO	262.5
2 - METIL - 1 - BUTENO	262.5
3 - METIL - 1 - BUTENO	262.5
2 - METIL - 2 - BUTENO	262.5
1 - HEXENO	318.1
PROPADIENO	130.4
1 - 2 - BUTADIENO	186.0
1 - 3 - BUTADIENO	186.0
CICLOPENTANO	254.0
METIL - CICLOPENTANO	309.6
ETIL - CICLOPENTANO	365.2
CICLOHEXANO	312.6
METIL - CICLOHEXANO	359.2
ETIL - CICLOHEXANO	351.2

BENCENO	270.9
TOLUENO	317.5
ORTO - XILENO	367.1
META - XILENO	365.1
PARA - XILENO	367.1
ETILBENCENO	365.1
HIDROGENO	5.4
NITROGENO	74.0
OXIGENO	59.4
MONOXIDO DE CARBONO	64.4
DIOXIDO DE CARBONO	78.6
ESTIRENO	344.2
AGUA	33.7
AMONIACO	45.1
ACETONA	201.5
i - PROPANOL	226.6
i - PROPILETER	368.7
n - PROPANOL	226.6
ACIDO CLORHIDRICO	62.7
FORMIATO DE AMONIO	137.8
METANOL	110.0
ETANOL	165.6

CALCULO DE VISCOSIDADES
SUBROUTINA VISC



NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA

V I S C

- B : Parámetro intermedio en el cálculo de la viscosidad de mezclas en la fase gaseosa.
- C : Parámetro intermedio en el cálculo de la viscosidad de mezclas en la fase gaseosa.
- CS : Vector : guarda los valores de la constante de Souders de los componentes de la mezcla, multiplicada por el peso molecular.
- CTROL : Vector : guarda los tipos de cada uno de los componentes de la mezcla :
1. - Componente no polar.
 2. - Componente polar con enlaces de hidrógeno.
 3. - Componente polar sin enlaces de hidrógeno.
- DELTA : Parámetro intermedio en el cálculo de las viscosidades de los componentes puros en el caso que éstos sean líquidos a una temperatura superior a su punto de ebullición normal.
- DENS : Vector : guarda los valores de las densidades de todos los componentes; se emplea en el caso de mezclas líquidas.
- DENSR : Densidad reducida
- EPS : Vector auxiliar en el cálculo de las viscosidades de componentes puros.
- MU : Vector : guarda las viscosidades de cada uno de los componentes de la mezcla en Cp.
- MULG : Viscosidad de la mezcla en Cp.

- NCOMP : Número de componentes de la mezcla.
- NLG : Tipo de fluido :
1. - Gas.
 2. - Líquido.
- PC : Vector : guarda las presiones críticas de todos los componentes de la mezcla.
- PH 1 : Matriz auxiliar en el método de Wilke.
- PM : Vector : guarda los pesos moleculares de todos los componentes de la mezcla.
- S : Parámetro intermedio en el cálculo de la viscosidad de mezclas gaseosas.
- T : Temperatura en °R.
- TC : Vector : guarda las temperaturas críticas de los componentes de la mezcla.
- TEB : Vector : guarda las temperaturas de ebullición normales.
- TR : Vector : guarda las temperaturas reducidas.
-
- VC : Vector : guarda los volúmenes críticos
- Z : Vector : guarda la composición (fracciones mol).
- ZC : Vector : guarda los factores de compresibilidad críticos.

EJEMPLO DE CALCULO.

Para ejemplificar el empleo de la subrutina VISC se desarrolló un programa que lee el número de componentes de la mezcla para la que se desee la viscosidad, la temperatura, el tipo de fluido (líquido o gaseoso), la composición de la mezcla y la densidad de cada uno de los componentes en el caso de que se trate de un líquido, así como las propiedades físicas de los componentes, los cuales serán mandados a VISC por medio del bloque COMMON PROPS. Después de hacer la lectura, el programa llama a la subrutina VISC e imprime el resultado obtenido en la misma.

Con el fin de que el ejemplo no fuera muy largo, se corrieron nada más dos opciones de entre todas las posibles :

OPCION 1 :

Supóngase que se quiere calcular la viscosidad de una mezcla binaria de etileno y etano a 150° C y baja presión.

Los datos de los componentes son :

Componente	Peso Molecular	Temperatura de Ebullición.
Etileno	28.06	305.10 ° R
Etano	30.07	332.30 ° R

Componente	Temperatura Crítica	Presión Crítica
Etileno	509.60 °R	742.0 PSIA
Etano	549.70 °R	708.0 PSIA

Componente	Volumen Crítico	Factor de Compresibilidad Crítico
Etileno	1.99 ft ³ /lb. mol	0.270
Etano	2.37 ft ³ /lb. mol	0.285

La mezcla consta de 0.1865 en fracción mol de etileno y 0.8135 en fracción mol de etano.

En este caso los dos componentes están en fase gaseosa y son no polares. La viscosidad de cada uno de ellos puros así como la viscosidad de la mezcla se calculan empleando las correlaciones descritas anteriormente.

OPCION 2 :

Se desea conocer la viscosidad del n-Heptano puro líquido en su punto de ebullición normal.

Los datos son los siguientes :

Componente	Peso Molecular	Temperatura de Ebullición
n - Heptano	100.20	668.90 °R

Componente	Temperatura Crítica	Presión Crítica
n - Heptano	972.50 °R	397.0 PSIA

Componente	Volumen Crítico	Factor de Compresibilidad Crítico
n - Heptano	6.82 ft ³ /lb. mol	0.259

El n - Heptano es no polar y se calcula su viscosidad en fase líquida por medio de las ecuaciones descritas antes.

En las páginas siguientes aparecen los listados de la subrutina VISC y del programa empleado para estos ejemplos, así como los resultados de la viscosidad obtenidos.

```
ES*RIUJLQ(1).VISCMAIN
```

```

1      1 FORMAT ('1',26X,13A6,/, '0 COMPONENTE',6X,'KTROL',4X,'F. MOL',6X,'
2      -P. MOL.',5X,'T. EB.',4X,'T. CRIT.',4X,'P. CRIT.',6X,'V. CRIT.',2X,
3      -' Z CRIT.',4X,'F. AC.',3X,'C. SOUDERS',/,38X,'[LB/LBMOL]',3X,'[G.
4      -R.]',5X,'[G. R.]',7X,'[PSIA]',5X,'[FT3/LBMOL]',/,(/,3X,2A6,F8.0,F1
5      -1.4,2F12.2,F11.2,F12.2,F13.2,F11.3,F10.3,F12.2)
6      2 FORMAT (/,61X,'VISCOSIDAD =',F10.4)
7      3 FORMAT (2A6, F7.2, 3F6.0, 3F5.0, 6X, F6.1, F2.0)
8      4 FORMAT (13A6)
9      5 FORMAT ( )
10     IMPLICIT REAL (K, M)
11     DIMENSION NOMBRE(2,20),TITULO(13),Z(20),F(20)
12     COMMON /PROPS/ NOMBRE,PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20),
13     -W(20),KTROL(20),PCOR(20),SOUDER(20)
14     COMMON /CBWRS/ NLG,NCOMP,CTE(20,11),CTEM(11)
15     COMMON /CVISC/ DENSL(20)
16     6 READ (5, 4, END=11) TITULO
17     READ (5,5) NCOMP, NLG, P, T, (Z(I), I=1, NCOMP)
18     T = T + 459.67
19     DO 7 I=1, NCOMP
20     7 READ (5,3) NOMBRE(1,I),NOMBRE(2,I),PM(I),TB(I),TC(I),PC(I),VC(I),
21     -ZC(I),W(I),SOUDER(I),KTROL(I)
22     WRITE (6,1) TITULO,(NOMBRE(1,I),NOMBRE(2,I),KTROL(I),Z(I),PM(I),
23     -TB(I),TC(I),PC(I),VC(I),ZC(I),W(I),SOUDER(I),I=1,NCOMP)
24     IF (NLG .NE. 1) GO TO 10
25     CALL BWRS
26     DO 9 I=1, NCOMP
27     DO 8 J=1, 11
28     8 CTEM(J) = CTE(I,J)
29     9 CALL DENFUG (Z, P, T, DENSL(I), F, 2, 1)
30     10 CALL VISC (NCOMP, Z, T, NLG, F, MU)
31     WRITE (6,2) MU
32     GO TO 6
33     11 STOP
34     END

```

ES*RI(1),VISC

```

1      SUBROUTINE VISC (NCOMP, Z, T, NLG, MU, MULG)
2      REAL MU(20), MULG
3      DIMENSION Z(20), PHI(20,20)
4      COMMON /CVISC/ DENS(20)
5      COMMON /PROPS/ COMP(2,20),PM(20),TEB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(2
6      -0),FAC(20),CTRL(20),PCOR(20),CS(20)
7      DO 13 I=1, NCOMP
8          IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 13
9          IF (NLG.EQ.1 .AND. T.LT.TEB(I)) GO TO 12
10         EPS = 5.43985527*(TC(I)/PC(I)**4)**0.16666667/SQRT(PM(I))
11         TR = T/TC(I)
12         K1 = CTRL(I)
13         GO TO (1, 3, 4), K1
14     C     GASES NO POLARES
15     1 IF (TR .GT. 1.5) GO TO 2
16     MU(I) = 34E-5*TR**0.94/EPS
17     GO TO 5
18     2 MU(I) = 1778E-7*(4.58*TR - 1.67)**0.625/EPS
19     GO TO 5
20     C     GASES POLARES, TIPO CON ENLACE DE HIDROGENO
21     3 MU(I) = (7.55E-5*TR - 0.55E-5)*ZC(I)**1.25/EPS
22     GO TO 5
23     C     GASES POLARES, SIN ENLACE DE HIDROGENO
24     4 MU(I) = (1.9E-4*TR - .29E-4)*ZC(I)**0.66666667/EPS
25     5 IF (NLG .EQ. 2) GO TO 13
26     DENSr = DENS(I)*VC(I)
27     GO TO (6, 7, 7), K1
28     C     LIQUIDOS NO POLARES
29     6 MU(I) = (((.0093324*DENSr - .040758)*DENSr + .05833)*DENSr
30     - + .023364)*DENSr + .1023)**4 - 1E-4)/EPS + MU(I)
31     GO TO 13
32     C     LIQUIDOS POLARES
33     7 IF(DENSr.GT. 0.1) GO TO 8
34     MU(I) = DENSr**1.11*16.56E-5/EPS + MU(I)
35     GO TO 13
36     8 IF (DENSr .GT. 0.9) GO TO 9
37     MU(I) = (9.045*DENSr + 0.63)**1.739*0.607E-5/EPS + MU(I)
38     GO TO 13
39     9 IF (DENSr .GT. 2.2) GO TO 10
40     MU(I) = EXP(-2.3025851*EXP(1.4826345 - .2314098*DENSr))/EPS + MU(I)
41     GO TO 13
42     10 IF (DENSr .GT. 2.6) GO TO 11
43     DELTA = (DENSr**3 - 10.65)**2*4.75E-4
44     MU(I) = EXP(-2.3025851*EXP(1.4826345 - .2314098*DENSr - 2.3025851*
45     -DELTA))/EPS + MU(I)
46     GO TO 13
47     11 IF (DENSr .LE. 2.8) MU(I) = .009/EPS + MU(I)
48     IF (DENSr .GT. 2.8) MU(I) = .025/EPS + MU(I)
49     IF (DENSr .GT. 3.0) *WRITE (6,21)
50     GO TO 13
51     12 MU(I) = EXP(EXP(3.692E-2*CS(I)*DENS(I) - 6.677)*2.3025851)*0.1
52     13 CONTINUE
53     IF (NCOMP .GT. 1) GO TO 14
54     MULG = MU(1)
55     RETURN
56     C     CALCULO DE LA VISCOSIDAD DE MEZCLA
57     14 MULG = 0.
58     IF (NLG .EQ. 1) GO TO 19
59     C     GASES
60     DO 16 I=1, NCOMP

```

```

61     IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 16
62     DO 15 J=1, NCOMP
63     IF (Z(J).LE.0.0 .OR. J.EQ.I) GO TO 15
64     B = SQRT(SQRT(PM(J)/PM(I))*MU(I)/MU(J)) + 1.0
65     C = SQRT((PM(I)/PM(J) + 1.0)*B.0)
66     PHI(I,J) = B*B/C
67   15 CONTINUE
68   16 CONTINUE
69     DO 18 I=1, NCOMP
70     IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 18
71     S = 0.
72     DO 17 J=1, NCOMP
73     IF (Z(J).LE.0.0 .OR. J.EQ.I) GO TO 17
74     S = PHI(I,J)*Z(J)/Z(I) + S
75   17 CONTINUE
76     MULG = MU(I)/(1. + S) + MULG
77   18 CONTINUE
78     RETURN
79   C
80   19 DO 20 I=1, NCOMP
81   20 IF (Z(I) .GT. 0.) MULG = ALOG(MU(I))*Z(I) + MULG
82     MULG = EXP(MULG)
83     RETURN
84   21 FORMAT (//,20X,'LA DENSIDAD REDUCIDA DEL LIQUIDO A UNA',/,20X,'TEM
85 -PERATURA MAYOR A LA DE SU PUNTO DE',/,20X,'EBULLICION NORMAL ES MA
86 -YOR DE 3.0',/)
87     END

```

MEZCLA GASEOSA DE ETILENO Y ETANO

COMPONENTE	KTROL	F. MOL	P. MOL. [LB/LBMOL]	T. FB. [G. R.]	T. CRIT. [G. R.]	P. CRIT. [PSIA]	V. CRIT. 7 [FT ³ /LBMOL]	CRIT.	F. AC.	C. SOURERS
ETANO	1.	.8135	30.07	332.30	549.70	708.00	2.37	.285	.105	116.60
ETILENO	1.	.1865	28.05	305.10	509.60	742.00	1.99	.270	.073	95.70

VISCOSIDAD = .0131

N-HEPTANO EN SU PUNTO DE EBULLICION NORMAL

COMPONENTE	K TROL	F. MOL	P. MOL. [LB/LRMOL]	T. FB. [G. R.]	T. CRIT. [G. P.]	P. CRIT. [PSIA]	V. CRIT. [FT ³ /LRMOL]	Z CRIT.	F. AC.	G. SOLIDOS
N-HEPTANO	1.	1.0000	100.20	668.90	472.50	397.00	6.82	.259	.352	394.60

e
 VISCOSIDAD = .2156

OF II.

CAPITULO IV

SUBROUTINA CPENID.

La determinación de la capacidad calorífica y de la entalpia es de gran importancia en los balances de energía y en el diseño o la simulación de equipos en los que el intercambio de calor es una parte fundamental, como en los cambiadores de calor y las torres de destilación. Asimismo, estas variables intervienen de una manera muy importante en todas las reacciones químicas. A continuación se presenta un método para evaluar estas propiedades.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA

Y ANALISIS MATEMATICO

El establecimiento de una ecuación para determinar la capacidad calorífica ideal a presión cero no ha tenido una base teórica hasta últimas fechas (1), (2) y el cálculo se hace mediante un polinomio de tercer grado obtenido de datos experimentales. Se han determinado los coeficientes del polinomio para un gran número de compuestos (3) y se obtiene un error menor del 1 % para la mayoría de ellos.

Más recientemente se han obtenido las constantes para el modelo teórico (4) para los mismos compuestos. Sin embargo, el porcentaje de error entre los resultados obtenidos mediante esta última ecuación y la polinomial son muy pequeños (de unas décimas).

Así pues la ecuación que predice la capacidad calorífica ideal (a presión cero) que se emplea aquí, tiene la forma :

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$$

tanto para la fase gaseosa como para la líquida (5).

El cálculo de la entalpía ideal para un compuesto en fase gaseosa se hace integrando la ecuación de la capacidad calorífica entre la temperatura de referencia y la temperatura a la que se desea conocer la entalpía y sumándole a este resultado el calor de formación del compuesto en el estado de referencia; se tomó como estado de referencia el de los elementos a 0 atm. de presión y 25°C de temperatura (6).

La entalpía en la fase líquida se calcula integrando la ecuación para la capacidad calorífica entre el estado de referencia (25°C) y la temperatura deseada, sumándole a este resultado el calor de formación del líquido en el estado de referencia. Este calor de formación del líquido se estima restandole el calor de vaporización a 25°C a la entalpía de formación del gas. De esta forma, tanto la entalpía del líquido como la del gas quedan referidas al mismo estado.

La subrutina BWRS que se describió anteriormente, hace el cálculo de la desviación de entalpía por presión, para ambas fases, con respecto al gas ideal a presión cero y temperatura de interés.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina CPENID hace el cálculo de la capacidad calorífica ideal para una mezcla empleando la ecuación polinomial; los coeficientes para cada componente, así como su calor de formación, llegan a la subrutina mediante el bloque COMMON PROPS.

CPENID calcula la capacidad calorífica para cada componente de la mezcla y la de la mezcla mediante un promedio de fracciones mol.

Los parámetros que requiere CPENID son :

- NCOMP : Número de componentes de la mezcla.
- T : Temperatura absoluta, en °R.
- X : Vector de fracciones mol de los componentes en fase líquida.
- Y : Vector de fracciones mol de los componentes en fase gaseosa.
- NLG : Fase de fluido :
 1. - Líquido.
 2. - Gas.

La subrutina regresa al programa principal.

- CP : Vector con las capacidades caloríficas de los componentes puros, en BTU/(lb. mol - °R).
- CPGAS : Capacidad calorífica en la fase gaseosa.
- CPLIQ : Capacidad calorífica en la fase líquida.

El cálculo de la entalpía ideal se hace mediante un ENTRY de CPENID llamado ENTALP.

Esta subrutina hace el cálculo para cada componente empleando una forma integrada de la ecuación polinomial y para la mezcla mediante un promedio de fracciones mol.

Los parámetros de ENTALP son :

- NCOMP : Número de componentes de la mezcla.
- T : Temperatura absoluta, en °R.
- X : Vector de fracciones mol de los componentes en fase líquida.
- Y : Vector de fracciones mol de los componentes en fase gaseosa.
- NLG : Fase de fluido :
 1. - Líquido.
 2. - Gas.
- H : Vector de entalpías ideales de los componentes puros.
- HV : Entalpía ideal en la fase gaseosa.
- HL : Entalpía ideal en la fase líquida.

NOMENCLATURA DE LA SUBRUTINA CPENID.

- AG, AL : Término de grado cero en la ecuación polinomial, para las fases gaseosa y líquida.
- BG, BL : Término de grado uno en la ecuación polinomial, para las fases gaseosa y líquida.
- CF : Calor de formación a 25°C, en Kcal/g mol.
- CG, CL : Término de grado dos en la ecuación polinomial, para las fases gaseosa y líquida.
- DG, DL : Término de grado tres en la ecuación polinomial, para las fases gaseosa y líquida.
- HV 25 : Calor latente de vaporización a 25°C, en cal/g.
- PM : Peso molecular.
- T : Temperatura, en °K.

EJEMPLO DE CALCULO.

Se tiene una mezcla de propano, i-butano, n-butano y n-pentano a 579.69°R , con la siguiente composición :

FASE LIQUIDA

COMPONENTE	FRACCION MOL
PROPANO	0.40
i-BUTANO	0.20
n-BUTANO	0.30
n-PENTANO	0.10

FASE GASEOSA

COMPONENTE	FRACCION MOL
PROPANO	0.25
i-BUTANO	0.25
n-BUTANO	0.30
n-PENTANO	0.20

Las constantes para la ecuación polinomial son :

FASE LIQUIDA

COMPONENTE.

PROPANO :

AL	BL	CL	DL
0.433027	0.391635×10^{-3}	-0.21819×10^{-5}	0.102882×10^{-7}

i-BUTANO :

AL	BL	CL	DL
0.145617	0.370016×10^{-2}	-0.16153×10^{-4}	0.290403×10^{-7}

n-BUTANO :

AL	BL	CL	DL
0.353969	0.157717×10^{-2}	-0.79313×10^{-5}	0.171717×10^{-7}

n-PENTANO :

AL	BL	CL	DL
0.463639	0.123858×10^{-3}	-0.21751×10^{-5}	0.102882×10^{-7}

FASE GASEOSA

COMPONENTE.

PROPANO :

AG	BG	CG	DG
-1.0085687	0.31499×10^{-2}	-37.890×10^{-6}	7.6778×10^{-9}

i-BUTANO :

AG	BG	CG	DG
-2.1289000	0.100204×10^{-5}	5.802×10^{-6}	12.1915×10^{-9}

n-BUTANO :

AG	BG	CG	DG
-0.5854339	0.35864×10^{-2}	-43.433×10^{-6}	-69.74318×10^{-9}

n-PENTANO :

AG	BG	CG	DG
-0.8661951	1.6434×10^{-2}	-61.630×10^{-6}	12.6705×10^{-9}

Las otras constantes necesarias son :

COMPONENTE	PM	CF	HV 25
PROPANO	44.09	-24.820	81.76
i-BUTANO	58.12	-31.452	78.63
n-BUTANO	58.12	-29.812	86.63
n-PENTANO	72.15	-35.000	87.54

Se desea calcular la capacidad calorífica ideal y la entalpia ideal de cada uno de los componentes y de la mezcla en las dos fases a la temperatura dada.

Para llevar a cabo estos cálculos, se hizo un programa que leyera las constantes, la temperatura y la composición de las dos fases y que llamara a la subrutina CPENID. Este programa imprime los resultados obtenidos por la subrutina. En las páginas siguientes aparecen listados del programa principal y de la subrutina así como los resultados obtenidos para el problema que se acaba de describir.

ES=RIOJLQ(1).CPENIDMAIN

```

1      DIMENSION CP(20),H(20),X(20),Y(20),TITULO(13)
2      COMMON/PROPS/COMP(2,20),PM(20),VAR(180),AG(20),BG(20),CG(20),DG(2
3      /),AL(20),BL(20),CL(20),DL(20),CF(20),VAR2(160),HV25(20)
4      1 READ(5,7,END=19) NCOMP,TITULO
5      DO 2 I=1,NCOMP
6      2 READ(5,8) COMP(1,I),COMP(2,I),PM(I),CF(I),HV25(I),AG(I),BG(I),
7      /CG(I),DG(I),AL(I),BL(I),CL(I),DL(I)
8      READ(5,9) T,(X(I),I=1,NCOMP),(Y(I),I=1,NCOMP)
9      NLG = 1
10     CALL CPENID(NCOMP,T,X,Y,NLG,CP,CPGAS,CPLIQ)
11     CALL ENTALP(NCOMP,T,X,Y,NLG,H,HV,HL)
12     WRITE(6,10) TITULO,T
13     WRITE(6,13)
14     WRITE(6,11)
15     DO 3 I=1,NCOMP
16     3 WRITE(6,12) COMP(1,I),COMP(2,I),AL(I),BL(I),CL(I),DL(I)
17     WRITE(6,14)
18     DO 4 I=1,NCOMP
19     4 WRITE(6,15) COMP(1,I),COMP(2,I),CP(I),H(I)
20     WRITE(6,16) CPLIQ,HL
21     NLG = 2
22     CALL CPENID(NCOMP,T,X,Y,NLG,CP,CPGAS,CPLIQ)
23     CALL ENTALP(NCOMP,T,X,Y,NLG,H,HV,HL)
24     WRITE(6,17)
25     WRITE(6,18)
26     DO 5 I=1,NCOMP
27     5 WRITE(6,12) COMP(1,I),COMP(2,I),AG(I),BG(I),CG(I),DG(I)
28     WRITE(6,14)
29     DO 6 I=1,NCOMP
30     6 WRITE(6,15) COMP(1,I),COMP(2,I),CP(I),H(I)
31     WRITE(6,16) CPGAS,HV
32     7 FORMAT(12,13A6)
33     8 FORMAT(2A6,F7.2,47X,F8.1,F6.1,/,8F10.0)
34     9 FORMAT( )
35     10 FORMAT('1',28X,13A6,/,53X,'TEMPERATURA=',2X,F9.2,2X,'G.R.',/)
36     11 FORMAT(/,29X,'COMPONENTE',15X,'AL',15X,'BL',15X,'CL',15X,'DL',/)
37     12 FORMAT(28X,2A6,7X,E15.8,2X,E15.8,2X,E15.8,/)
38     13 FORMAT(61X,'FASE LIQUIDA',/)
39     14 FORMAT(/,42X,'COMPONENTE',15X,'CP',15X,'ENTALPIA',/)
40     15 FORMAT(41X,2A6,9X,E12.5,6X,E12.5,/)
41     16 FORMAT(/,42X,'CP DE LA MEZCLA=',2X,E12.5,2X,'BTU/LB-MOL - G.R.',/
42     /,42X,'ENTALPIA DE LA MEZCLA=',2X,E12.5,2X,'BTU/LB-MOL',/)
43     17 FORMAT(61X,'FASE GASEOSA',/)
44     18 FORMAT(/,29X,'COMPONENTE',15X,'AG',15X,'BG',15X,'CG',15X,'DG',/)
45     19 STOP
46     END

```

ES*RIJULQ(1),CPENID

```

1 SUBROUTINE CPENID(NCOMP,T1,X,Y,NLG,CP,CPGAS,CPLTQ)
2 COMMON/PROPS/COMP(2,20),PM(20),VAR(180),AG(20),RG(20),DG(20)
3 /,AL(20),BL(20),CL(20),DL(20),CF(20),VAR2(160),HV25(20)
4 DIMENSION CP(20),H(20),X(20),Y(20)
5 T = T1*0.555555556
6 IF(NLG.EQ.1) GO TO 2
7 CPGAS=0.0
8 DO 1 I=1,NCOMP
9 IF (Y(I) .LE. 0.) GO TO 1
10 CP(I) = (((DG(I)*T+CG(I))*T+BG(I))*T+AG(I))
11 CPGAS = CPGAS + CP(I)*Y(I)
12 1 CONTINUE
13 RETURN
14 2 CPLIQ=0.0
15 DO 3 I=1,NCOMP
16 IF (X(I) .LE. 0.) GO TO 3
17 CP(I) = (((DL(I)*T+CL(I))*T+BL(I))*T+AL(I))*PM(I)
18 CPLIQ = CPLIQ + CP(I)*X(I)
19 3 CONTINUE
20 RETURN
21 ENTRY ENVALP(NCOMP,T1,X,Y,NLG,H,HV,HL)
22 T = T1*0.555555556
23 IF(NLG.EQ.1) GO TO 5
24 HV=0.0
25 DO 4 I=1,NCOMP
26 IF (Y(I) .LE. 0.) GO TO 4
27 H(I) = (((((0.25*DG(I)*T+.333*CG(I))*T+.5*BG(I))*T+AG(I))*T
28 /- (((.25*DG(I)*298.0+.333*CG(I))*298.0+.5*BG(I))*298.0+AG(I))*298.
29 -) + 1000.0*CF(I))*1.8
30 HV = HV + H(I)*Y(I)
31 4 CONTINUE
32 RETURN
33 5 HL=0.0
34 DO 6 I=1,NCOMP
35 IF (X(I) .LE. 0.) GO TO 6
36 H(I) = (((((0.25*DL(I)*T+.333*CL(I))*T+.5*BL(I))*T+AL(I))*T
37 /- (((.25*DL(I)*298.0+.333*CL(I))*298.0+.5*BL(I))*298.0+AL(I))*298.
38 -)-HV25(I))*PM(I) + 1000.0*CF(I))*1.8
39 HL = HL + H(I)*X(I)
40 6 CONTINUE
41 RETURN
42 END

```

CALCULO PARA UNA MEZCLA DE CUATRO COMPONENTES

TEMPERATURA= 579.69 G.R.

FASE LIQUIDA

COMPONENTE	A1	B1	C1	D1
PROPANO	.43302700+00	.39163500-03	-.21019000-05	.10288200-07
1-BUTANO	.14501700+00	.37001600-02	-.10153000-04	.20040300-07
2-BUTANO	.35394900+00	.15771700-02	-.79313000-05	.17171700-07
3-PENTANO	.46302900+00	.12385800-03	-.21751000-05	.10288200-07

COMPONENTE

CP

ENTALPIA

PROPANO	.29827+02	-.49920+05
1-BUTANO	.36727+02	-.63311+05
2-BUTANO	.35619+02	-.61231+05
3-PENTANO	.44847+02	-.72494+05

CP DE LA MEZCLA= .34447+02 BTU/LB-MOL - G.R.

ENTALPIA DE LA MEZCLA= -.58249+05 BTU/LB-MOL

FASE GASEOSA

COMPONENTE	AG	BG	CG	DG
PROPANO	-.10005680+01	.73149900-01	-.37890000-04	.76778000-08
1-BUTANO	-.21280000+01	.10020400+00	-.55802000-04	.12191500-07
2-BUTANO	-.58543300+00	.93586400-01	-.48483000-04	.97431800-08
3-PENTANO	-.86619500+00	.11643400+00	-.61630000-04	.12670500-07

COMPONENTE

CP

ENTALPIA

PROPANO	.18876+02	-.43886+05
1-BUTANO	.24761+02	-.55577+05

N-HUTANO	.24851+02	-.52620+05
N-PENTANO	.30663+02	-.61715+05
CP DE LA MEZCLA=	.24497+02	BTU/LB-MOL - G.R.
ENTALIA DE LA MEZCLA=	-.52995+05	BTU/LB-MOL

CAPITULO V

SUBROUTINA EQUIL.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA.

En el manejo tanto de fluidos puros como de mezclas en un proceso, al modificarse las condiciones de operación, puede ocurrir que el fluido se separe en una fase líquida y en una fase vapor. Se establece entonces un equilibrio dinámico entre las dos fases. Si esta separación ocurre a una presión y a una temperatura constante se tiene un problema de un "FLASH" isotérmico. Lo que se trata de determinar en este tipo de problemas es la cantidad de vapor y la cantidad de líquido que se tienen a esas condiciones, así como la composición de las dos fases.

Los cálculos necesarios para obtener los resultados anteriores involucran un balance de materia y el cálculo de las constantes de equilibrio líquido-vapor (K 's), las cuales establecen la relación que existe entre la fracción mol en el vapor y la fracción mol en el líquido para cada uno de los componentes de la mezcla. Existen varios métodos para calcular estas constantes; algunos de ellos involucran el cálculo de los coeficientes de fugacidad en las dos fases y el cálculo del coeficiente de actividad en la fase líquida. Otros métodos requieren de la presión de convergencia del sistema que se esté manejando, la cual depende de la temperatura de operación, así como de la composición del líquido en equilibrio. El cálculo de las fracciones de vapor y de líquido es bastante complicado ya que la función a la que se llega es periódica y debido a

su complejidad requiere de un método iterativo para su solución.

MODELO MATEMATICO.

Supóngase que una corriente de F moles por unidad de tiempo, con un número n de componentes y una composición Z_i en fracción mol, llega a un recipiente que se mantiene a una presión P y a una temperatura T . Las corrientes de salida se suponen en equilibrio una con la otra.

Supondremos que existe una fase vapor y una fase líquida, que no se lleva a cabo ninguna reacción química y que las constantes de equilibrio líquido-vapor se pueden calcular a partir de la composición de cada fase y de la temperatura y la presión del sistema. Mediante un balance de materia en todo el recipiente, tenemos para el componente i :

$$F \cdot Z_i = L \cdot X_i + V \cdot Y_i \quad (1)$$

donde :

L : es la cantidad de líquido por unidad de tiempo que sale del recipiente.

V : es la cantidad de vapor por unidad de tiempo que sale del recipiente.

X_i : es fracción mol en el líquido.

Y_i : es fracción mol en el vapor.

Por otro lado, el balance de materia total nos da :

$$F = L + V \quad (2)$$

Dividiendo la ecuación 1 entre F, tenemos :

$$Z_i = \frac{L}{F} X_i + \frac{V}{F} Y_i \quad (3)$$

si

$$\alpha = \frac{V}{F} \text{ entonces } \frac{L}{F} = 1 - \alpha$$

y como

$$K_i = \frac{Y_i}{X_i} \quad (4)$$

tenemos

$$Z_i = (1 - \alpha) \cdot X_i + \alpha \cdot Y_i \quad (5)$$

Expresando el lado derecho de esta ecuación en función de X_i , tenemos :

$$Z_i = X_i [1 + \alpha (K_i - 1)] \quad (6)$$

Expresando el lado derecho de la ecuación (5), ahora en función de Y_i , tenemos.:

$$Z_i = Y_i [1/K_i + \alpha (1 - 1/K_i)]$$

como

$$\sum_{i=1}^n X_i = 1 \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^n Y_i = 1 \quad (7)$$

por lo tanto

$$\sum_{i=1}^n X_i - \sum_{i=1}^n Y_i = 0$$

Podemos entonces definir una función $f(\alpha)$ de la siguiente manera :

$$f(\alpha) = \sum_{i=1}^n X_i - \sum_{i=1}^n Y_i = \sum_{i=1}^n \frac{Z_i (1 - K_i)}{1 + \alpha (K_i - 1)} = 0 \quad (8)$$

El valor de α para el cual esta ecuación es cierta, corresponde a la fracción de vapor que se tiene en el equilibrio a las condiciones de operación dadas P y T.

La función $f(\alpha)$ anterior es periódica y existen muchos valores de α que son solución de la ecuación (8); sin embargo, el único valor de interés es aquel que se encuentre entre 0 y 1, si es que existe. En el caso de que no se encuentre ninguna raíz entre 0 y 1, se tienen dos posibilidades: si α es inferior a cero, entonces la mezcla está abajo de su punto de burbuja y es líquida; si por el contrario, α es superior a 1, la mezcla está por encima de su punto de rocío y sólo se tiene vapor. La solución de la ecuación (8), como se dijo anteriormente, requiere de un método iterativo.

METODO DE SOLUCION.

Las constantes de equilibrio líquido-vapor deben determinarse por alguno de los métodos mencionados anteriormente. Escogimos un método que requiere de la presión de convergencia y que se basa en las ecuaciones siguientes:

$$K_i = \frac{\text{EXP} (1.0 - \text{Pr})^{0.33/\text{Tr}} \cdot Q_i \cdot R_i}{\text{Pr}} \quad (9)$$

donde:

$$Q_i = \left(\frac{-0.1968}{Tr_i^2} - 4.4316 \right) / Tr_i - \ln(P_c) + 10.7016 \quad (10)$$

y

$$R_i = 6.3816 - 29.002 \cdot Z_{ci} + 35 \cdot 3443 \cdot Z_{ci}^2 \quad (11)$$

y donde

K_i : es la constante de equilibrio del componente i.

P : es la presión de trabajo.

P_c : es la presión de convergencia.

P_r : P/P_c .

Tr_i : es la temperatura reducida del componente i, y

Z_{ci} : es el factor de compresibilidad crítico del componente i.

Una vez calculada α , la composición en la fase líquida se puede determinar por medio de la ecuación (6) como :

$$X_i = \frac{Z_i}{1 + \alpha (K_i - 1)} \quad (12)$$

La composición en la fase vapor se puede calcular entonces mediante la ecuación (4).

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina EQUIL hace el cálculo de un flash isotérmico y calcula la fracción de vapor, las constantes de equilibrio líquido-vapor y la composición tanto en la fase líquida como en la fase vapor a las condiciones a las que se esté trabajando.

EQUIL calcula las constantes de equilibrio líquido-vapor por medio de las ecuaciones 9, 10 y 11 descritas anteriormente. Después se calcula la fracción de vapor mediante un proceso iterativo basado en el método de Newton-Raphson (este método se describe en un capítulo posterior) :

- 1.- Se comienza con el método normal, es decir, multiplicando a la corrección por 1.
- 2.- Se supone una fracción de vapor igual a 0.5.
- 3.- Se calculan la función (ecuación 8) y su derivada.
- 4.- Si el valor absoluto de la función es menor o igual que $1 \cdot 10^{-5}$ se considera bueno el resultado y se calcula la composición de las dos fases.
- 5.- Si el valor absoluto de la función es mayor de $1 \cdot 10^{-5}$ se calcula un nuevo valor de la fracción de vapor.
- 6.- Si este nuevo valor de la fracción de vapor no está comprendido entre 0 y 1, se toma un multiplicador de la corrección igual a 0.5 y se vuelve al paso 2.

- 7.- Si los pasos del 2 al 6 se han repetido 3 veces, se vuelve a tomar un multiplicador de la corrección de 1 y se vuelve al paso 2. (De ser así, se salta el paso que consiste en tomar el multiplicador de 0.5).

La subrutina EQUIL requiere de los siguientes parámetros en su lista de argumentos :

- Z : Vector con la composición inicial.
P : Presión de operación.
NCOMP : Número de componentes de la mezcla.
PCONV : Presión de convergencia.

y regresará al programa principal :

- V : Fracción de vapor.
X : Vector con la composición en la fase líquida.
Y : Vector con la composición en la fase vapor.
CEQ : Vector con las constantes de equilibrio líquido-vapor.

EQUIL emplea también el bloque COMMON PROPS ya que requiere de los factores de compresibilidad críticos y de las temperaturas críticas de los componentes para poder efectuar el cálculo.

NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA

E Q U I L.

- ALFA : Multiplicador de la corrección para la fracción mol de vapor en el método de Newton-Raphson.
- C : Constante auxiliar en la evaluación de la función y de su derivada.
- DF : Derivada de la función de "FLASHEO".
- F : Función de "FLASHEO"
- ITER : Control de iteraciones en el método de Newton-Raphson.
- PC : Vector de presiones críticas de los componentes de la mezcla, en PSIA.
- PR : Relación entre la presión de trabajo y la presión de convergencia.
- Q, R : Variables auxiliares en el cálculo de las constantes de equilibrio.
- TC : Vector de temperaturas críticas de los componentes de la mezcla, en °R.

EJEMPLO DE CALCULO.

Supóngase que se tiene la siguiente mezcla :

COMPONENTE	FRACCION MOL
Metano	.018
Etano	.051
Propano	.080
N - Butano	.274
N - Pentano	.354
N - Hexano	.168
N - Heptano	.045

Las condiciones son : 60 PSIA de presión y 105°F de temperatura. La presión de convergencia para esta mezcla es de 2400.

El programa da como resultado una fracción mol de vapor de .0809.

El listado de resultados se muestra a continuación.

ES*R10JLQ(1).EQUILMAIN

```

1      1 FORMAT(12,13A6)
2      2 FORMAT(2A6,T28,F6.0,T50,F5.0)
3      3 FORMAT ('1' ,1X, 'D A T O S' ,//,42X, 'PRESION =',F7.2, ' PSTIA, TEMPER
4      -ATURA =',F7.2, ' G. F.' ,//,45X, 'COMPONENTE',6X, 'F. MOL',4X, 'T. CR.'
5      -,4X, 'Z. CR.' ,//,71X, '(G.R.)' ,//, (46X,2A6,F9.4,F10.1,F10.3))
6      4 FORMAT (///,57X, 'R E S U L T A D O S' ,//,60X, 'ALFA =',F6.4,//,38X,
7      -'COMPONENTE',11X, 'FRACCION MOL',9X, 'CTE. EQUILIBRIO',/,55X, 'LIQUID
8      -O',8X, 'VAPOR',//, (37X,2A6,7X,F6.4,7X,F6.4,7X, E10.3,/) )
9      5 FORMAT ( )
10     DIMENSION Z(20),X(20),Y(20),CEQ(20),TITULO(13)
11     COMMON/PROPS/COMP(2,20),VAR1(40),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20),
12     /VAR2(160)
13     6 READ(5,1,END=8)NCOMP,TITULO
14     DO 7 I=1,NCOMP
15     7 READ 2,COMP(1,I),COMP(2,I),TC(I),ZC(I)
16     READ 5,PCONV,(Z(I),I=1,NCOMP),P,T
17     PRINT 3,P,T,(COMP(1,I),COMP(2,I),Z(I),TC(I),ZC(I),I=1,NCOMP)
18     CALL EQUIL (Z,P,CEQ,ALFA,X,Y,NCOMP,T+459.67,PCONV)
19     PRINT 4,ALFA,(COMP(1,I),COMP(2,I),X(I),Y(I),CEQ(I),I=1,NCOMP)
20     GO TO 6
21     8 STOP
22     END

```

ES*RIQJLQ(1),EQUIL

```

1      SUBROUTINE EQUIL (Z, P, CEQ, V, X, Y, NCOMP, T, PCOMV)
2      DIMENSION Z(20), TR(20), Q(20), R(20), CEQ(20), X(20), Y(20)
3      COMMON/PROPS/COMP(2,20), VAR1(40), TC(20), PC(20), VC(20), ZC(20),
4      /VAR2(160)
5      PR=P/PCOMV
6      DO 1 I=1, NCOMP
7      IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 1
8      TR(I)=T/TC(I)
9      Q(I) = (-.1968/(TR(I)*TR(I))-4.4316)/TR(I)-ALOG(PCONV)+10.7016
10     R(I)=(35.3443*ZC(I)-29.002)*ZC(I)+6.3816
11     CEQ(I) = EXP((1.0-PR)**(0.33/TR(I))*Q(I)*R(I))/PR
12     1 CONTINUE
13     ENTRY FLASH (Z, CEQ, V, X, Y, NCOMP)
14     ALFA=1.0
15     ITER=1
16     2 V=0.5
17     3 F=0.0
18     DF=0.0
19     DO 4 I=1, NCOMP
20     IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 4
21     C=1.0-CEQ(I)
22     C=C/(1.0-C*V)
23     F=Z(I)*C+F
24     DF=Z(I)*C*C+DF
25     4 CONTINUE
26     IF (ABS(F) .LT. 1E-5) GO TO 5
27     V=V-F*ALFA/DF
28     IF (V .LT. 0.0 .OR. V .GT. 1.0) GO TO 7
29     GO TO 3
30     5 DO 6 I=1, NCOMP
31     IF (Z(I) .GT. 0.) GO TO 9
32     X(I) = 0.
33     Y(I) = 0.
34     GO TO 6
35     9 X(I)=Z(I)/((CEQ(I)-1.0)*V+1.0)
36     Y(I)=X(I)*CEQ(I)
37     6 CONTINUE
38     RETURN
39     7 ITER=1+ITER
40     IF (ITER .GT. 3) GO TO 8
41     ALFA=ALFA*0.5
42     GO TO 2
43     8 ALFA=1.0
44     GO TO 3
45     END

```

D A T O S

PRESION = 60.00 PSIA, TEMPERATURA = 105.00 G. F.

COMPONENTE	F. MOL	T. CR. (G.R.)	Z. CR.
METANO	.0180	343.3	.290
ETANO	.0510	549.7	.285
PROPANO	.0800	665.8	.277
N-BUTANO	.2740	765.4	.274
N-PENTANO	.3640	845.1	.269
N-HEXANO	.1680	913.1	.264
N-HEPTANO	.0450	972.5	.259

R E S U L T A D O S

ALFA = .0809

COMPONENTE	FRACCION MOL		CTE. EQUILIBRIO
	LIQUIDO	VAPOR	
METANO	.0038	.1795	.474+02
ETANO	.0317	.2706	.854+01
PROPANO	.0712	.1802	.253+01
N-BUTANO	.2774	.2357	.850+00
N-PENTANO	.3860	.1134	.294+00
N-HEXANO	.1811	.0188	.104+00
N-HEPTANO	.0488	.0018	.366-01

CAPITULO VI

SUBROUTINA CONDUCT.

Los datos de conductividad térmica son de importancia en varias aplicaciones de ingeniería química que involucran procesos de transferencia de calor tales como condensación, evaporación, destilación, reacciones químicas que requieran de enfriamiento o de calentamiento. También son de gran importancia en el diseño de cambiadores de calor.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA

Y ANALISIS MATEMATICO

CONDUCTIVIDAD TERMICA DE GASES.

Existen varios métodos semiempíricos para calcular la conductividad térmica de gases a bajas presiones.

Euken (1) propuso la ecuación :

$$k M/\mu = [(9 - 5/\gamma) / 4] \cdot C_p$$

donde :

$$\gamma = C_p / C_v$$

k : es conductividad térmica.

M : es peso molecular.

μ : es viscosidad.

C_p : es capacidad calorífica a presión constante, y

C_v : es capacidad calorífica a volumen constante.

Esta ecuación se modificó después para calcular la conductividad tér

mica de gases a altas temperaturas y se obtuvo :

$$k M/\mu = (1.77 - 0.45 / \gamma) \cdot C_p$$

Mediante un análisis teórico más detallado del proceso de conducción Mason y Monchick (1) llegaron a la ecuación :

$$k M/\mu = 1.32 \cdot C_v + 1.77 \cdot R - 0.917 \cdot \sum_{i=1}^n C_{v_i} / Z_i$$

donde :

R : es la constante de los gases.

Z : es el número de colisiones entre moléculas necesario para intercambiar un cuanto de energía interna con energía traslacional.

i : se refiere al modo de almacenamiento de energía considerado, y

n : es el número de modos de almacenar energía.

Bromley propuso varias ecuaciones (1).

Para gases monoatómicos :

$$M k/\mu = 2.5 \cdot C_v$$

Para moléculas lineales (no polares) :

$$M k/\mu = 1.30 \cdot C_v + 3.4 - 0.7/T_r$$

donde T_r es temperatura reducida.

Para moléculas no lineales :

$$M k/\mu = 1.3 \cdot C_v + 3.6 - 0.3 \cdot C_{ir} - 0.69/T_r - 3 \alpha$$

donde :

C_{ir} : es capacidad calorífica interna, y

α : es un coeficiente de interacción de colisión.

Este método da un error menor al 10 %.

Misic y Thodos eliminaron la necesidad de conocer la viscosidad a la temperatura de interés y propusieron un método empírico basado en un análisis dimensional.

Las ecuaciones basadas en el método de Misic y Thodos para diferentes grupos de compuestos dan por lo general un error menor al 5 %.

La conductividad térmica depende de la temperatura y varía con la presión. Touloukian (2) correlacionó datos experimentales obtenidos de varias fuentes y estableció ecuaciones polinomiales de segundo grado para estimar la conductividad térmica de un gran número de compuestos a 1 atmósfera de presión, con un error del 5 %.

CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS GASEOSAS.

Con el fin de calcular la conductividad térmica de mezclas gaseosas, a bajas presiones, Wassiljewa (3) propuso la ecuación :

$$k_m = \sum_{i=1}^n k_i / (1.0 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n A_{ij} \cdot (x_j / x_i))$$

donde :

k_m : es la conductividad térmica de la mezcla en cal/cm-seg°K

y x_i : es la fracción mol del componente i.

A_{ij} es un parámetro, el cual correlacionaron Lindsay y Bromley (3) - con el peso molecular, la viscosidad, la temperatura y la constante de Sutherland, obteniendo la expresión :

$$A_{ij} = \frac{1}{4} \cdot (1.0 + ((\mu_i/\mu_j) \cdot (M_j/M_i)^{3/4} \cdot [(1.0 + S_i/T)/(1.0 + S_j/T)]^{1/2})^2 \cdot [(1.0 + S_{ij}/T)/(1.0 + S_i/T)]$$

donde :

μ_i : es la viscosidad del componente i

M_i : es el peso molecular del componente i, y

S_i : es la constante de Sutherland para el componente i, la cual es igual a $1.5 T_{bi}$

donde : T_{bi} es la temperatura de ebullición normal del componente i, en °K, y

$$S_{ij} = (S_i \cdot S_j)^{1/2}$$

Para corregir la conductividad térmica por presiones elevadas, Stiel y Thodos propusieron la correlación siguiente :

$$(k - k^*) \cdot \lambda \cdot Z_{cm}^5 = 14.0 \cdot (\text{EXP}(0.535 \cdot \rho_r) - 1.0) \cdot 10^{-8}$$

para $\rho_r < 0.5$

$$(k - k^*) \cdot \lambda \cdot Z_{cm}^5 = 13.1 \cdot (\text{EXP}(0.67 \cdot \rho_r) - 1.069) \cdot 10^{-8}$$

para $0.5 < \rho_r < 2$

$$(k - k^*) \cdot \lambda \cdot Z_{cm}^5 = 2.976 \cdot (\text{EXP}(1.155 \cdot \rho_r) + 2.016) \times 10^{-8}$$

para $2.0 < \rho_r < 2.8$

donde :

k : es la conductividad térmica en cal/(cm-seg°K) a presión elevada.

k^* : es la conductividad térmica a 1 atmósfera de presión.

Z_{cm} : es el factor de compresibilidad crítico de la mezcla

ρ_r : es la densidad molar reducida, en g mol/litro, y

$$\lambda = M_m^{1/2} \cdot T_{cm}^{1/6} / P_{cm}^{2/3}$$

donde :

M_m : es el peso molecular de la mezcla

T_{cm} : es la temperatura crítica de la mezcla, y

P_{cm} : es la presión crítica de la mezcla.

(T_{cm} y P_{cm} se obtienen de las reglas de mezclado de Prausnitz y Gunn (1)).

CONDUCTIVIDAD TERMICA DE LIQUIDOS.

La conductividad térmica de los líquidos orgánicos es de 10 a 100 veces mayor que la de los mismos compuestos gaseosos a baja presión y a la misma temperatura. La presión influye poco en la conductividad térmica de los líquidos y la variación con la temperatura es inversamente proporcional.

Se han propuesto muchas técnicas para estimar la conductividad térmica de los líquidos puros, empíricas y teóricas.

Sheffy y Johnson propusieron la ecuación :

$$k_L = \frac{(4.66 \cdot 10^{-3} \cdot (1 - 0.00126 \cdot (T - T_m)))}{T_m^{0.216} \cdot M^{0.3}}$$

donde :

T : es la temperatura, en °K

T_m : es la temperatura de fusión, en °K

M : es el peso molecular, y

k_L : es la conductividad térmica del líquido en cal/(cm - seg - °K)

Esta ecuación es empírica y da un error medio de 13 %.

Robbins y Kingrea propusieron :

$$k_L = ((88.0 - 4.94 \cdot H) \cdot 10^{-3}) / \Delta S^* \cdot (0.55/T_R)^n \cdot C_p \cdot \rho^{4/3}$$

donde :

n y H : son parámetros que dependen de la estructura molecular, y de la densidad del líquido a 20°C.

ΔS^* : es la entropía de vaporización modificada de Everett.

T_R : es la temperatura reducida

C_p : es la capacidad calorífica molar del líquido en cal/(g-mol - °K)

ρ : es la densidad molar del líquido, en g-mol/cm³, y

k_L : es la conductividad térmica del líquido, en cal/(cm - seg - °K).

Esta ecuación da un error máximo del 10 %.

Existen otros métodos para estimar la conductividad térmica pero Touloukian (2) correlacionó datos experimentales también para líquidos y obtuvo también polinomios del segundo grado.

CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS LIQUIDAS.

Generalmente las ecuaciones para calcular la conductividad térmica de una mezcla a partir de los valores de los componentes puros tienen la forma :

$$k_{Lm} = k_{L1} \cdot X_1 + k_{L2} \cdot X_2 - CX_1X_2$$

donde :

X : es fracción peso, y

C : es una constante

$$= 0.72 |k_{L2} - k_{L1}| \quad (\text{según Filippov})$$

Esta ecuación es para dos componentes nada más. En este trabajo se emplea esta última ecuación para una mezcla de más de dos componentes, calculando primero la conductividad térmica para dos de ellos y tomando el resultado como la conductividad térmica de uno solo y volviendo a hacer el cálculo con este resultado y el dato para el tercer componente; así sucesivamente hasta completar todos los componentes de la mezcla.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina CONDUCT leva a cabo el cálculo de la conductividad térmica tanto para la fase líquida como para la gaseosa, para un componente puro y para una mezcla.

El cálculo para los componentes puros se hace mediante los polinomios propuestos por Touloukian; el cálculo para una mezcla en fase gaseosa se hace mediante el método de Lindsay y Bromley a 1 atm. de presión y se corrige mediante el método de Stiel y Thodos; el cálculo para una mezcla en fase líquida se hace empleando el método de Filippov.

Todas las correlaciones anteriores están hechas en sistema decimal y por lo tanto CONDUCT hace la transformacion de los datos que le llegan mediante el bloque COMMON PROPS para poderlos emplear.

La subrutina CONDUCT requiere de los siguientes parámetros para hacer el cálculo :

- NCOMP : Número de componentes.
- Z : Fracción mol de los componentes.
- T : Temperatura absoluta, °R.
- P : Presión absoluta, PSIA.
- NLG : Control de fase :
 - = 1 : Fase líquida.
 - = 2 : Fase vapor.

MU : Vector de viscosidades de los componentes, en cp.

Como resultado del cálculo se obtienen :

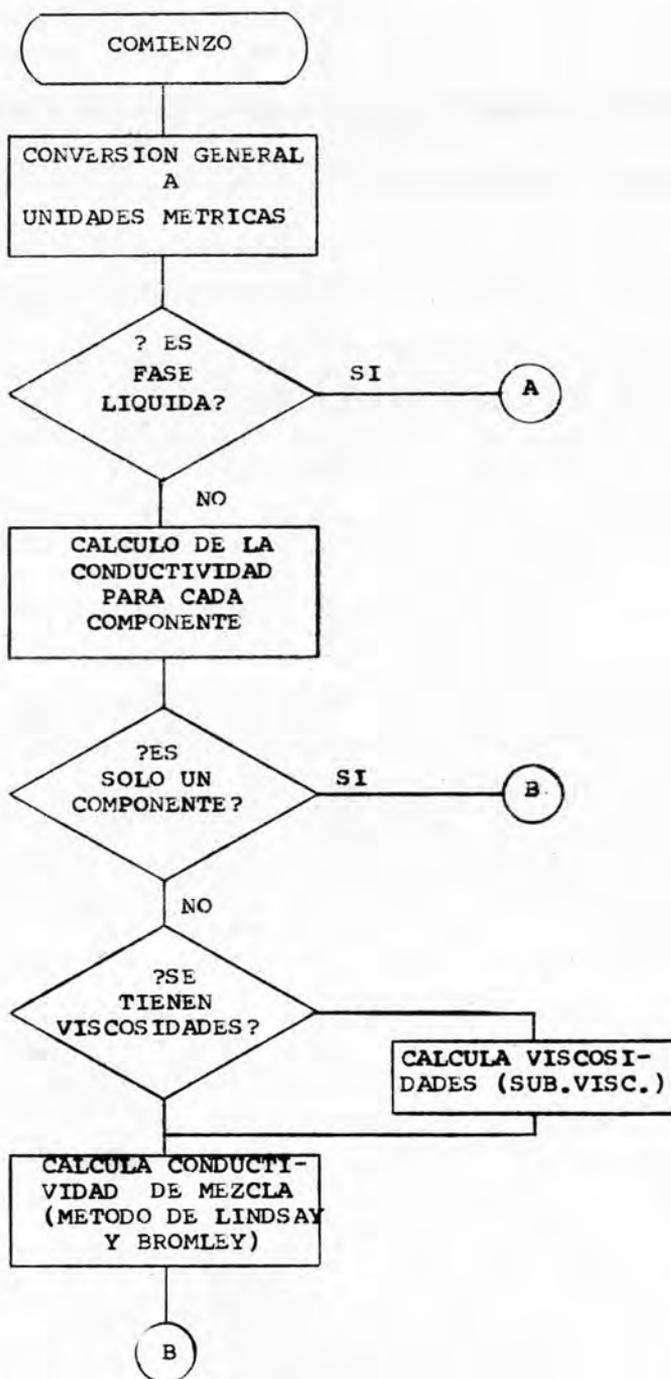
COND : Vector de conductividades de los componentes puros
(cal/seg-cm-°K).

CONDLG: Conductividad térmica a baja presión (cal/seg-cm-°K)

DESV : Corrección por presión (cal/seg-cm-°K)

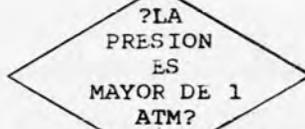
CONDEV: Conductividad real (cal/seg-cm-°K)

COND1 : Conductividad real (BTU/hr-ft-°R).

SUBROUTINA CONDUCT
DIAGRAMA DE BLOQUES

195

B



SI

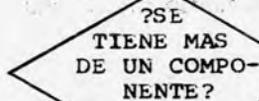
SE CORRIGE POR PRESION POR EL METODO DE STIEL Y THODOS

NO

REGRESA CONTROL A PROGRAMA PRINCIPAL

A

CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD DE CADA COMPONENTE



SI

CALCULA CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLA POR REGLA DE FILIPPOV

NO

REGRESA CONTROL A PROGRAMA PRINCIPAL

NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA

C O N D U C

- A : Parámetro de Lindsay y Bromley en el cálculo de la conductividad térmica de mezclas en fase gaseosa.
- DR : Densidad reducida de la mezcla gaseosa.
- GAMMA : Parámetro intermedio en el cálculo de la desviación por presión de la conductividad térmica de gases.
- MULG : Viscosidad de la mezcla líquida o gaseosa.
- PCM : Presión seudoreducida en el caso de una mezcla gaseosa.
- PMP : Peso molecular promedio en el caso de una mezcla gaseosa.
- PI : Presión, en atm.
- SI : Constante de Sutherland para el componente i.
- SIJ : Constante de Sutherland para una mezcla de componentes i, j.
- SJ : Constante de Sutherland para el componente j.
- SUM : Sumatoria intermedia en el cálculo de la conductividad térmica de una mezcla gaseosa o líquida.

- TCM : Temperatura pseudocrítica en el caso de una mezcla gaseosa.
- TEB1 : Vector de temperaturas de ebullición normales, en °K.
- T 1 : Temperatura, en °K.
- VCM : Volumen pseudocrítico.
- X1, X2 : Parámetros intermedios para la regla de Filippov en el caso de líquidos.
- ZCM : Factor de compresibilidad pseudocrítico.

EJEMPLO DE CALCULO.

Se escogió como primer ejemplo una mezcla gaseosa de .486 de metano y .514 de propano, en fracción mol, a 662°R y presión atmosférica. Las viscosidades son $10.49 \cdot 10^{-5}$ y $6.34 \cdot 10^{-5}$ cp, respectivamente.

Las otras constantes requeridas son :

	PM	TEB	TC	PC	VC	ZC
Metano	16.04	201.1	343.3	673	1.59	.29
Propano	44.09	416.0	665.8	617	3.2	.277

Para la conductividad :

	AKG	BKG	CKG
Metano	- $5.1545 \cdot 10^{-6}$	$2.49649 \cdot 10^{-7}$	$1.6007 \cdot 10^{-10}$
Propano	- $2.5725 \cdot 10^{-5}$	$1.99967 \cdot 10^{-7}$	$1.0164 \cdot 10^{-10}$

Como segundo ejemplo se presenta una mezcla de cloroformo y éter etílico al 50 %, a 536.7°R y presión atmosférica. En este caso no se requieren las viscosidades. Las demás constantes son :

	PM	TEB	TC	PC	VC	ZC
Cloroformo	119.39	602.82	965.88	793.8	14.97	.294
Eter etílico	74.12	554.04	838.44	523.32	17.09	.255

Y para la conductividad :

Cloroformo	$423.344 \cdot 10^{-6}$	- $0.4802 \cdot 10^{-6}$
Eter etilico	$597.554 \cdot 10^{-6}$	- $0.9642 \cdot 10^{-6}$

IS=RIOJLQ(1).CONDUCCMAIN

```

1     DIMENSION Z(20),COND(20),TITULO(13)
2     REAL KTROL
3     COMMON /CVISC/DENS(20)
4     COMMON /PROPS/COMP(2,20),PM(20),TEB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20)
5     1),FAC(20),KTROL(20),PCOR(20),CS(20),VAR1(80),VAR2(80),CF(20),AKG(2
6     10),BKG(20),CKG(20),AKL(20),BKL(20),CKL(20)
7     REAL MU(20)
8     1 READ(5,7,END=15) NCOMP,NLG,NV,TITULO
9     DO 2 I=1,NCOMP
10    2 READ(5,8) COMP(1,I),COMP(2,I),PM(I),TEB(I),TC(I),PC(I),VC(I),ZC(I)
11    1,KTROL(I),AKG(I),BKG(I),CKG(I),AKL(I),BKL(I),CKL(I)
12    IF(NV.EQ.0) GO TO 3
13    READ(5,9) T,P,(MU(I),I=1,NCOMP),(Z(I),I=1,NCOMP)
14    GO TO 4
15    3 READ(5,9) T,P,(Z(I),I=1,NCOMP)
16    4 CALL CONDOC(NCOMP,Z,T,P,NLG,MU,COND,CONDLG,DESV,CONDEV,COND1)
17    IF(NLG.EQ.1) GO TO 5
18    WRITE(6,10)
19    GO TO 6
20    5 WRITE(6,11)
21    6 WRITE(6,12) TITULO
22    WRITE(6,13)
23    IF(NLG.EQ.1) DESV = 0.0
24    T = T*0.5555556
25    P = P*0.0680272
26    WRITE(6,14) P,T,CONDLG,DESV,CONDEV,COND1
27    GO TO 1
28    7 FORMAT(3I2,12A6,A2)
29    8 FORMAT(2A6,F7.2,3F6.0,2F5.0,17X,F2.0,/,6F10.0)
30    9 FORMAT( )
31    10 FORMAT('1',34X,'CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS DE HIDROCARBUROS
32    1EN FASE GASEOSA',/,6X,'SE CALCULAN A 1 ATM POR EL METODO DE LINDSA
33    1Y Y BROMLEY. A PRESIONES MAYORES SE CORRIGEN POR EL METODO DE STIE
34    1L Y THODOS'///)
35    11 FORMAT('1',34X,'CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS DE HIDROCARBUROS
36    1EN FASE LIQUIDA',/,46X,'SE CALCULAN MEDIANTE LA REGLA DE FILIPPOV'
37    1,///)
38    12 FORMAT(29X,12A6,A2,///)
39    13 FORMAT(12X,'PRESION',T31,'TEMPERATURA',T51,'COND.TERM.',T71,'CORRE
40    1CCION',T95,'CONDUCTIVIDAD TERMICA',/,13X,'(ATMS)',T31,'(GRAD. K. )
41    1',T49,'(CAL/SEG CM GK)',T68,'(CAL/SEG CM GK)',T88,'(CAL/SEG CM GK)
42    1',T108,'(BTU/HR FT GR)',///)
43    14 FORMAT(8X,F10.3,T31,F10.3,4(9X,1PE11.4))
44    15 STOP
45    END

```

ES*RIQJLQ(1),CONDOC

```

1  SUBROUTINE CONDOC(NCOMP,Z,T,P,NLG,MU,COND,CONDLG,DESV,CONDEV
2  /,COND1)
3  DIMENSION Z(20),COND(20),A(20,20),TEB1(20),TC1(20),PC1(20),
4  -VC1(20)
5  COMMON /PROPS/COMP(2,20),PM(20),TEB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20)
6  /,FAC(20),CTRL(20),PCOR(20),CS(20),VAR1(80),VAR2(80),CF(20),AKS(2
7  /0),BKG(20),CKG(20),AKL(20),BKL(20),CKL(20)
8  REAL MU(20),MULG
9  DO 1 I=1,NCOMP
10  TEB1(I)=TEB(I)*0.5555556
11  TC1(I)=TC(I)*0.5555556
12  PC1(I)=PC(I)*0.0680272
13  1 VC1(I)=VC(I)*62.427961
14  T1=T*0.5555556
15  P1=P*0.0680272
16  IF(NLG-1)2,19,2
17  DO 3 I=1,NCOMP
18  3 COND(I)=(CKG(I)*T1+BKG(I))*T1+AKG(I)
19  IF(NCOMP,GT.1) GO TO 4
20  CONDLG = COND(1)
21  GO TO 95
22  4 IF(MU(1),NE.0.0) GO TO 5
23  CALL VISC(NCOMP,Z,T,NLG,MU,MULG)
24  5 DO 6 I=1,NCOMP
25  DO 6 J=1,NCOMP
26  IF(I.EQ.J) GO TO 6
27  SI=1.5*TEB1(I)
28  SJ=1.5*TEB1(J)
29  SIJ=SQRT(SI*SJ)
30  A(I,J)=0.25*(1.0+SQRT(MU(I)/MU(J)*(PM(J)/PM(I))**0.75*((1.0+SI/T1)
31  -/(1.0+SJ/T1))))**2*((1.0+SIJ/T1)/(1.0+SI/T1))
32  6 CONTINUE
33  CONDLG=0.0
34  DO 9 I=1,NCOMP
35  SUM=0.0
36  DO 8 J=1,NCOMP
37  IF(I=J)7,8,7
38  7 IF(Z(I),GT.0.0.AND.Z(J),GT.0.0) SUM=SUM+A(I,J)*7(J)/Z(I)
39  8 CONTINUE
40  9 CONDLG=CONDLG+COND(I)/(1.0+SUM)
41  95 NERR=0
42  DESV=0.0
43  IF(P1,GT.1.0) GO TO 11
44  10 CONDEV=CONDLG+DESV
45  COND1=CONDEV*241.75
46  IF(NERR.EQ.1) WRITE(6,26)
47  RETURN
48  11 RHO=12.194643*P1/T1
49  TCM=0.0
50  VCM=0.0
51  ZCM=0.0
52  PMP=0.0
53  DO 12 I=1,NCOMP
54  TCM=TCM+TC1(I)*Z(I)
55  VCM=VCM+VC1(I)*Z(I)
56  ZCM=ZCM+ZC(I)*Z(I)
57  12 PMP=PMP+PM(I)*Z(I)
58  PCM=0.0820544*TCM*ZCM/VCM
59  GAMMA=(TCM**0.166667)*SQRT(PMP)/(PCM**0.666667)
60  DR=RHO*VCM

```

```

61      IF(DR-0.5) 13,14,14
62      13 DESV=14.0*(EXP(0.535*DR)-1.0)*1.0E-8/(GAMMA*ZCM**5)
63      GO TO 10
64      14 IF(DR-2.0) 15,16,16
65      15 DESV=13.1*(EXP(0.67*DR)-1.069)*1.0E-8/(GAMMA*ZCM**5)
66      GO TO 10
67      16 IF(DR-2.8) 18,18,17
68      17 NERR=1
69      18 DESV=2.972*(EXP(1.155*DR)+2.016)*1.0E-8/(GAMMA*ZCM**5)
70      GO TO 10
71      19 DO 20 I=1,NCOMP
72      20 COND(I)=(CKL(I)*T1+BKL(I))*T1+AKL(I)
73      IF(NCOMP.GT.1) GO TO 21
74      CONDLG = COND(1)
75      GO TO 25
76      21 SUM = Z(1)*PM(1)
77      DO 22 I=2, NCOMP
78      Z1 = SUM
79      Z2 = Z(I)*PM(I)
80      SUM = SUM + Z2
81      22 CONDLG = (-ABS(CONDLG-COND(I))*0.72*Z1*Z2/SUM+CONDLG*Z1+COND(I)*Z2
82      -)/SUM
83      25 COND1=CONDLG*241.75
84      CONDEV = CONDLG
85      26 FORMAT(52X,'***DENSIDAD REDUCIDA ALTA***')
86      RETURN
87      END

```

CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS DE HIDROCARBUROS EN FASE GASEOSA
 SE CALCULAN A 1 ATM POR EL METODO DE LINDSAY Y BROMLEY. A PRESIONES MAYORES SE CORRIGEN POR EL METODO DE STIEL Y THODOS

EJEMPLO PARA UNA MEZCLA GASEOSA DE METANO Y PROPANO

PRESION (ATM)	TEMPERATURA (GRAD. K.)	COND. TERM. (CAL/SEG CM GK)	CORRECCION (CAL/SEG CM GK)	CONDUCTIVIDAD TERMICA (CAL/SEG CM GK) (BTU/HR FT GR)
1.000	368.161	7.5706-05	0.0000	7.5706-05 1.8302-02

CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS DE HIDROCARBUROS EN FASE LIQUIDA
SE CALCULAN MEDIANTE LA REGLA DE FILIPPOV

EJEMPLO PARA UNA MEZCLA LIQUIDA DE CLOROFORMO Y ETIL-ETER

PRESION (ATM)	TEMPERATURA (GRAD. K.)	COND.TERM. (CAL/SEG CM GK)	CORRECCION (CAL/SEG CM GK)	CONDUCTIVIDAD TERMICA (CAL/SEG CM GK)	CONDUCTIVIDAD TERMICA (BTU/HR FT GF)
1.000	298.161	1.2560-04	0.0000	1.2560-04	3.0363-02

CAPITULO VII

SUBROUTINA ECVAP

La determinación de la presión de vapor, así como del calor latente de vaporización tiene importancia en los procesos de evaporación, de condensación y de humidificación.

Estas variables pueden calcularse por varios métodos, empleando propiedades reducidas, una sustancia de referencia o bien ecuaciones que empleen constantes empíricas.

ANALISIS MATEMATICO.

A continuación se describen dos métodos para obtener la presión de vapor y uno para obtener el calor latente de vaporización. El primero se basa en el empleo de las propiedades reducidas y el segundo, así como el método para el calor latente de vaporización, se basan en el empleo de una sustancia de referencia.

Empleando las propiedades reducidas, se puede llegar a una correlación para obtener la presión de vapor (1). Esta correlación emplea a la temperatura reducida y al factor de Riedel o al factor acéntrico de Pitzer. Se tiene :

$$\log P_{VR} = - \Phi (T_R) - (\alpha_c - 7) \cdot \Psi (T_R) \quad 1)$$

donde :

P_{VR} : Es la presión de vapor reducida, en atm.

T_R : Es la temperatura reducida.

α_c : Es el factor de Riedel y está relacionado con el factor acéntrico de Pitzer por la ecuación :

$$\omega = 0.203 (\alpha_c - 7.0) + 0.242 \quad 2)$$

donde ω es el factor acéntrico de Pitzer,

$\Phi(T_R)$: = $0.118 \cdot \phi(T_R) - 7.0 \cdot \log T_R$, y

$\Psi(T_R)$: = $0.0364 \cdot \phi(T_R) - \log T_R$

donde $\phi(T_R) = 36/T_R + 42 \cdot \ln T_R - 35.0 - T_R^6$

El método basado en una sustancia de referencia (2), presenta todas las funciones de presión de vapor como líneas rectas.

La ecuación general es :

$$\log P_V = (\lambda / \lambda') \cdot \log P'_V + C \quad 3)$$

donde :

P_V : Es la presión de vapor del compuesto.

P'_V : Es la presión de vapor de la sustancia de referencia.

λ : Es el calor latente de vaporización del compuesto.

λ' : Es el calor latente de vaporización de la sustancia de referencia, y

C : Es una constante.

Esta ecuación es de la forma :

$$Y = mx + c \quad 4)$$

donde :

$Y = \log P_V$, y

$$x = \log P'_v$$

y se puede usar directamente para calcular la presión de vapor, evaluando primero las constantes :

m : Es igual a λ/λ' , y

c : Es la ordenada al origen, en el punto donde :

$$x = \log P'_v = 0 \quad \text{ó bien} \quad \log P'_v = \log 1$$

La sustancia de referencia es el agua. En la referencia (2) se dan unas tablas para el logaritmo de la presión de vapor y para el calor latente de vaporización del agua en un rango de temperaturas entre 32 y 662°F y para las constantes m y c para 500 compuestos.

METODO DE SOLUCION.

Con el fin de poder calcular de una manera rápida y fácil la presión de vapor y el calor latente de vaporización del agua, la cual es la sustancia de referencia, se tomaron valores de la tabla 1 de la referencia (2) y se ajustaron con ayuda del programa AJUSTE, el cual se describe en un capítulo posterior y se obtuvieron las siguientes ecuaciones para el rango de temperaturas entre 32 y 662°F (estos resultados son los que se presentan como ejemplo del programa AJUSTE).

$$\log P'_v = \frac{4.9582155 \times 10^{-2} + 2.08045935 \times 10^{-2} \times T}{1.0 + 2.59358867 \times 10^{-3} \times T} \quad 5)$$

y :

$$\lambda' = (((-9.9949659 \times 10^{-8} \times T + 8.59661959 \times 10^{-5}) \times T - 3.3553601 \times 10^{-2}) \times T - 5.32746124) \times T + 19454.5112 \quad 6)$$

donde :

$\log P'_v$: Es el logaritmo de la presión de vapor del agua, en mm Hg.

λ' : Es el calor latente de vaporización, en BTU/lb mol, y

T : Es la temperatura, en °F.

Estas correlaciones dan errores de menos del 1.5 % con respecto a los datos experimentales de la referencia (2) y se emplean en el programa PSICRO para establecer la carta psicrométrica para el agua, este programa también se explica en un capítulo posterior.

En el caso de que no se conozcan las constantes c y m para algún compuesto, éstas se pueden determinar teniendo dos puntos de temperatura y la correspondiente presión de vapor, sustituyendo los valores en la ecuación 3) y obteniendo las relaciones :

$$c = \frac{\log P_{v2} - \log P_{v1} \cdot \log P'_{v2} / \log P'_{v1}}{1.0 - \log P'_{v2} / \log P'_{v1}} \quad 7)$$

y

$$m = \frac{\log P_{v1} - c}{\log P'_{v1}}$$

donde :

P_{v1} : Es la presión de vapor dada a la temperatura T_1

P_{v2} : Es la presión de vapor dada a la temperatura T_2 .

P'_{v1} : Es la presión de vapor del agua a la temperatura T_1 .

P'_{v2} : Es la presión de vapor del agua a la temperatura T_2 .

La presión de vapor y el calor latente de vaporización de una mezcla se calculan mediante promedio de fracciones mol.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina ECVAP puede hacer el cálculo de la presión de vapor y del calor latente de vaporización de un componente puro y de una mezcla empleando los dos métodos descritos anteriormente.

Las propiedades críticas, el factor acéntrico y las constantes m y c llegan a la subrutina mediante el bloque COMMON PROPS.

ECVAP hará el cálculo por uno de los dos métodos y regresará el control al programa principal, si se quiere el cálculo por el otro método habrá que llamarla otra vez.

ECVAP emplea las funciones FTEMP y FHV, las cuales calculan el logaritmo de la presión de vapor y el calor latente de vaporización del agua respectivamente, mediante las ecuaciones 5) y 6).

La subrutina ECVAP requiere de los siguientes parámetros para hacer el cálculo :

NTIPO : Variable de control para el método de cálculo :

= 1 : Método de propiedades reducidas o de Riedel.

= 2 : Método de Othmer.

NCOMP : Número de componentes de la mezcla.

T : Temperatura, en °F.

PV : Matriz de presiones de vapor conocidas de compuestos para los que se desconocen las constantes c y m de

Othmer. (2 valores para cada compuesto), en mm Hg.

TV : Matriz de temperaturas a las cuales se conocen las presiones de vapor PV (2 valores para cada componente), en °F.

Y regresa al programa principal :

PVAP : Vector de presiones de vapor de los componentes puros, en mm Hg.

HVAP : Vector de calores latentes de vaporización de los componentes, en BTU/lb-mol.

PVAPM : Presión de vapor de la mezcla, en mm Hg.

HVAPM : Calor latente de vaporización de la mezcla, en BTU/lb-mol.

NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA

ECVAP

- ALFAC : Resultado intermedio en el cálculo de la presión de vapor por el método de Riedel.
- C : Constante c de Othmer.
- CM : Constante m de Othmer.
- EPSI : Resultado intermedio en el cálculo de la presión de vapor por el método de Riedel.
- FAC : Vector que guarda los valores de los factores acéntricos de los componentes de la mezcla.
- FHV : Función para el cálculo del calor latente de vaporización del agua, en BTU/lb-mol agua.
- FTEMP : Función para el cálculo del logaritmo de la presión de vapor del agua.
- HVH20 : Calor latente de vaporización del agua, en BTU/lb-mol de agua.
- PC : Vector que guarda las presiones críticas de los componentes de la mezcla, en PSIA.
- PHI : Resultado intermedio en el cálculo de la presión de vapor por el método de Riedel.
- PHIM : Resultado intermedio en el cálculo de la presión de vapor por el método de Riedel.
- PVH20 : Logaritmo de la presión de vapor del agua.

- PVNH20 : Vector de dos elementos que guarda los valores de dos presiones de vapor conocidos en el caso de que no se conozcan las constantes c y m de Othmer.
- T : Temperatura, en °F.
- TC : Vector que guarda las temperaturas críticas de los componentes de la mezcla.
- TR : Temperatura reducida.

EJEMPLO DE CALCULO.

Con el fin de ilustrar el empleo de la subrutina ECVAP, se corrieron dos ejemplos.

Ejemplo 1 :

Se desean calcular la presión de vapor y el calor latente de vaporización de una mezcla de benceno, tolueno y orto-xileno con 0.401, 0.388 y 0.211 en fracción mol respectivamente; los datos para esta mezcla son :

COMPONENTE	TC	PC	FA	m	c
BENCENO	1012.0	714.0	0.215	0.7688	0.918
TOLUENO	1066.0	611.0	0.279	0.8544	0.2834
O-XILENO	1137.0	525.0	0.300	0.9597	-0.4721

La temperatura es de 212 grados Fahrenheit.

Ejemplo 2 :

Se desea conocer la presión de vapor y el calor latente de vaporización del cloroformo puro a 212 grados Fahrenheit. Los datos que se tienen son :

COMPONENTE	TC	PC	FA
CLOROFORMO	965.88	793.8	0.214

Las constantes c y m de Othmer no se conocen pero se tienen dos parejas de valores :

TEMPERATURA	PRESION DE VAPOR
°F	mm Hg
32.0	61.0
122.0	526.0

Para correr estos ejemplos, se hizo un programa principal que leyera los datos necesarios, llamara a la subrutina ECVAP e imprimiera los resultados. Las constantes de los componentes se transfieren de este programa principal a la subrutina mediante el bloque COMMON PROPS el cual se describió anteriormente. En las páginas siguientes se muestran los listados del programa principal y de la subrutina ECVAP así como los resultados obtenidos para los ejemplos anteriores.

```

ES=RIOJLQ(1).ECVAPMAIN
 1 DIMENSION PVAP(20),HVAP(20),TV(20,2),PV(20,2),TITULO(13),Y(20)
 2 COMMON /PROPS/COMP(2,20),VAR1(40),TC(20),PC(20),VAR2(40),FAC(20),
 3 /VAR3(300),CM(20),C(20)
 4 1 READ(5,9,END=20)NCOMP,TITULO
 5 READ(5,10)T,(Y(I),I=1,NCOMP),((TV(I,J),J=1,2),T=1,NCOMP),((PV(I,J)
 6 /,J=1,2),I=1,NCOMP)
 7 DO 2 I=1,NCOMP
 8 2 READ(5,11)COMP(1,I),COMP(2,I),TC(I),PC(I),FAC(I),CM(I),C(I)
 9 NTIPO = 1
10 3 CALL ECVAP(NTIPO,NCOMP,Y,T+459.67,PV,TV,PVAP,HVAP,PVAPM,HVAPM)
11 IF(NTIPO.E9.2) GO TO 7
12 WRITE(6,12) TITULO,T
13 DO 5 I=1,NCOMP
14 5 WRITE(6,13) COMP(1,I),COMP(2,I),TC(I),PC(I),FAC(I),CM(I),C(I)
15 WRITE(6,14)
16 DO 6 I=1,NCOMP
17 6 WRITE(6,15) COMP(1,I),COMP(2,I),PVAP(I)
18 WRITE(6,16) PVAPM
19 NTIPO = 2
20 GO TO 3
21 7 WRITE(6,17)
22 DO 8 I=1,NCOMP
23 8 WRITE(6,18)COMP(1,I),COMP(2,I),PVAP(I),COMP(1,I),COMP(2,I),HVAP(I)
24 WRITE(6,19) PVAPM,HVAPM
25 GO TO 1
26 9 FORMAT(12,13A6)
27 FORMAT( )
28 11 FORMAT(2A6,5F7.0)
29 12 FORMAT('1',//,52X,'CALCULO DE PRESIONES DE VAPOR',//,28X,13A6,//,
30 /53X,'TEMPERATURA =' ,2X,F7.2,//,64X,'DATOS',//, 39X,'COMPONENTE',10
31 /X,'TC',10X,'PC',10X,'FA',10X,'M',10X,'C',//)
32 13 FORMAT(38X,2A6,6X,F7.2,5X,F7.2,5X,F7.5,4X,F7.5,4X,F7.5//)
33 14 FORMAT(//,51X,'CALCULO POR EL METODO DE RIEDEL',//)
34 15 FORMAT(28X,'PRESION DE VAPOR DEL ',2A6,' =' ,T87,F9.3,2X,'MM HG',/)
35 16 FORMAT(36X,'PRESION DE VAPOR DE LA MEZCLA=' ,T79,F9.3,////)
36 17 FORMAT(//,51X,'CALCULO POR EL METODO DE OTHMER',//)
37 18 FORMAT(28X,'PRESION DE VAPOR DEL ',2A6,' =' ,T87,F9.3,2X,'MM HG',/
38 /,28X,'CALOR LATENTE DE VAPORIZACION DEL ',2A6,' =' ,T87,F9.3,2X,'BT
39 /J/LB-MOL',/)
40 19 FORMAT(30X,'PRESION DE VAPOR DE LA MEZCLA=' ,T79,F9.3,2X,'MM HG',//
41 /,36X,'CALOR LAT. DE VAP. DE LA MEZCLA=' ,T79,F9.3,2X,'BTU/LB-MOL')
42 20 STOP
43 END

```

ES*RIOLQ(1).ECVAP

```

1      SUBROUTINE ECVAP (I, TIPO, NCOMP, Z, T1, PV, TV, PVAP, HVAP, PVAPM, HVAPM)
2      COMMON/PHOPS/COMP(Z,20), VAP1(40), TC(20), PC(20), VAR2(40), FAC(20),
3      /VAR3(300), CM(20), C(20)
4      DIMENSION PVAP(20), PHI(20), EPSI(20), PHIM(20), ALFAC(20), PV(20,2), TV
5      / (20,2), PVNH20(2), HVAP(20), TR(20), Z(20)
6      IF (N TIPO - 2) 1,4,4
7      1 DO 2 I=1, NCOMP
8          IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 2
9          TR(I)=T1/TC(I)
10         PHIM(I)=36.0/TR(I)+42.0*ALOG(TR(I))-35.0-TR(I)**6
11         PHI(I)=0.118*PHIM(I)-7.0*ALOG10(TR(I))
12         EPSI(I)=0.0304*PHIM(I)-ALOG10(TR(I))
13         ALFAC(I)=(FAC(I)-0.242)*4.9261084+7.0
14         PVAP(I)=EXP(2.302585*(-PHI(I)-(ALFAC(I)-7.0)*EPSI(I)))*PC(I)*51.71
15         -4752
16     2 CONTINUE
17         PVAPM = 0.0
18         DO 3 I=1, NCOMP
19     3 IF (Z(I) .GT. 0.) PVAPM = PVAP(I)*Z(I) + PVAPM
20     RETURN
21     4 T = T1 - 459.69
22         PVH20=FTEMP(T)
23         HVH20=FHV(T)
24         DO 9 I=1, NCOMP
25             IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 9
26             IF (CM(I) .EQ. 0.0) GO TO 6
27     5 PVAP(I)=EXP(2.302585*(CM(I)*PVH20+C(I)))
28         GO TO 8
29     6 DO 7 J=1, 2
30     7 PVNH20(J)=FTEMP(TV(I, J))
31         C(I) = (ALOG10(PV(I, 2)) - ALOG10(PV(I, 1))*PVNH20(2)/PVNH20(1))/(1.
32         / - PVNH20(2)/PVNH20(1))
33         CM(I) = (ALOG10(PV(I, 1)) - C(I))/PVNH20(1)
34         GO TO 5
35     8 HVAP(I) = HVH20*CM(I)
36     9 CONTINUE
37         PVAPM = 0.0
38         HVAPM = 0.0
39         DO 10 I=1, NCOMP
40             IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 10
41         PVAPM = PVAPM + PVAP(I)*Z(I)
42         HVAPM = HVAPM + HVAP(I)*Z(I)
43     10 CONTINUE
44     RETURN
45     END

```

ES*RIQJLQ(1).FTEMP

```
1 FUNCTION FTEMP(T)
2 FTEMP = (4.95821550E-2 + 2.08046935E-2*T)/(1.0 + 2.59358867E-3*T)
3 RETURN
4 END
```

```
ES*RIOJLQ(1).FHV
```

```
1      FUNCTION FHV(T)
2      FHV = (((-9.9949659E-8*T + 8.59661959E-5)*T - 3.3553601E-2)*T - 5.
3      /32746124)*T + 19454.5112
4      RETURN
5      END
```

CALCULO DE PRESIONES DE VAPOR

CALCULO PARA UNA MEZCLA DE TRES COMPONENTES

TEMPERATURA = 671.69

DATOS

COMPONENTE	TC	PC	FA	M	C
BENCENO	1012.00	714.00	.21500	.76880	.91800
TOLUENO	1066.00	611.00	.27900	.85440	.28340
O-XILENO	1137.00	525.00	.30000	.95970	-.47210

CALCULO POR EL METODO DE RIEDEL

PRESION DE VAPOR DEL BENCENO	=	1335.189	MM HG
PRESION DE VAPOR DEL TOLUENO	=	532.005	MM HG
PRESION DE VAPOR DEL O-XILENO	=	191.312	MM HG
PRESION DE VAPOR DE LA MEZCLA=		782.195	

CALCULO POR EL METODO DE OTHMER

PRESION DE VAPOR DEL BENCENO	=	1350.439	MM HG
CALOR LATENTE DE VAPORIZACION DEL BENCENO	=	13403.458	BTU/LB-MOL
PRESION DE VAPOR DEL TOLUENO	=	552.354	MM HG
CALOR LATENTE DE VAPORIZACION DEL TOLUENO	=	14895.831	BTU/LB-MOL
PRESION DE VAPOR DEL O-XILENO	=	194.873	MM HG
CALOR LATENTE DE VAPORIZACION DEL O-XILENO	=	16731.658	BTU/LB-MOL
PRESION DE VAPOR DE LA MEZCLA=		796.958	MM HG
CALOR LAT. DE VAP. DE LA MEZCLA=		14684.749	BTU/LB-MOL

CALCULO DE PRESIONES DE VAPOR

CALCULO PARA UN COMPONENTE CON DOS DATOS DADOS

TEMPERATURA = 671.69

DATOS

COMPONENTE	TC	PC	FA	M	C
CLOROFORMO	965.88	793.80	.21400	.00000	.00000

CALCULO POR EL METODO DE RIEDEL

PRESION DE VAPOR DEL CLOROFORMO = 2359.619 MM HG

PRESION DE VAPOR DE LA MEZCLA= 2359.619

CALCULO POR EL METODO DE OTHMER

PRESION DE VAPOR DEL CLOROFORMO = 2370.289 MM HG
 CALOR LATENTE DE VAPORIZACION DEL CLOROFORMO = 12497.659 BTU/LB-MOL

PRESION DE VAPOR DE LA MEZCLA= 2370.289 MM HG

CALOR LAT. DE VAP. DE LA MEZCLA= 12497.659 BTU/LB-MOL

CAPITULO VIII

SUBROUTINA T E N S U P.

Cuando hay dos fases en contacto, la superficie de separación puede, en cierta forma, considerarse como una tercera fase con propiedades intermedias. En esta interfase existen altos gradientes de densidad y de energía molecular.

Una propiedad común a las interfases líquido-gas es la tensión superficial, que se manifiesta como una fuerza perpendicular a la superficie del líquido, dirigida hacia el seno de éste.

El fenómeno de tensión superficial se debe a las fuerzas de atracción intermoleculares en el líquido. Las moléculas de la superficie son atraídas hacia los lados y hacia la masa líquida, pero experimentan menos atracción hacia la fase gaseosa. Así pues, la interfase se comporta como una capa en tensión y tiende a contraerse hacia el área mínima compatible con la masa del material y las paredes del recipiente.

La tensión superficial se puede definir como el trabajo necesario para aumentar en una unidad de área la superficie de la interfase, o bien, como la fuerza ejercida en el plano de la superficie por unidad de longitud y se expresa ordinariamente en erg/cm^2 o din/cm .

ANALISIS MATEMATICO.

La evaluación de la tensión superficial se puede llevar a cabo mediante varios métodos; aquí se describen la correlación de Macleod-Sugden

y la correlación de estados correspondientes.

La primera se basa en la ecuación :

$$\sigma^{1/4} = P (\rho_L - \rho_V)$$

en donde :

σ : Tensión superficial, din/cm.

P : Paracoro.

ρ_L : Densidad de la fase líquida, g/cm³.

ρ_V : Densidad de la fase vapor, g/cm³.

El paracoro representa un volumen molecular convencional, verdaderamente comparable para diferentes sustancias, pues los compuestos se comparan bajo condiciones similares de tensión superficial, que es casi lo mismo que compararlos bajo igual grado de autocompresión por las fuerzas de cohesión intermoleculares. El paracoro se puede obtener como una función aditiva de átomos y grupos moleculares, y es aproximadamente independiente de la temperatura. Los errores son generalmente menores del 4 % para compuestos no polares. Para sustancias polares, la correlación es tan buena como cualquier otra.

La correlación de estados correspondientes empleada aquí es la de Brock y Bird (3).

$$\begin{aligned} \sigma/P_C^{2/3} T_C^{1/3} \\ = (.133 a_C - .281) (1 - T_r)^{11/9} \end{aligned}$$

donde :

T_r : Temperatura reducida.

α_c : Factor de Riedel.

P_c : Presión crítica, atm.

T_c : Temperatura crítica, °K.

Mediante esta ecuación, Brock y Bird representaron las tensiones superficiales de 84 compuestos orgánicos notablemente distintos, no polares, con una desviación media aproximada del 3 %. Definitivamente no es válida para compuestos polares (2).

MEZCLAS.

La ecuación de Macleod-Sudgen para mezclas se transforma en :

$$\sigma^{1/4} = \rho_L \sum_j^n P_j X_j - \rho_V \sum_j^n P_j Y_j$$

donde las densidades son consideradas molares y X_j , Y_j son las fracciones molares de líquido y vapor.

Para la correlación de estados correspondientes, el procedimiento más simple que se puede aplicar es el de suponer que las propiedades son promedios molares (regla de Kay). Esta técnica, en relación con otras, no muestra diferencia significativa en los errores calculados (2).

CONTRIBUCIONES ATOMICAS Y ESTRUCTURALES
PARA CALCULAR EL PARACORO (4).

C	9.2
H (unido a C o S)	15.4
H (unido a O)	10
H (unido a N)	12.5
H (unido a Cl)	12.8
H (unido a Br)	16.4
O (en hidróxilo, ésteres, éteres)	20
O (carboxilo, incluyendo doble enlace)	39
O ₂ (ésteres)	54.8
F	25.5
Cl	55
Br	69
I	90
N (aminas)	17.5
N (nitrilos, incluyendo triple enlace)	55.5
S	50
P	40.5
As	54
Sb	68
Se	63
B	21.5

Si	31
Be	42
Al	55
Cr	58
Tl	62
Sn	64.5
Hg	69
Bi	80
Anillo de 3 miembros	12.5
Anillo de 4 miembros	6
Anillo de 5 miembros	3
Anillo de 6 miembros	0.8
Anillo de 7 miembros	- 4.0
Enlace doble	19
Enlace doble semipolar	0
Enlace triple	38
Ligadura de singlete	- 9.5

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina que se presenta aquí emplea la correlación de MacLeod-Sugden y la de estados correspondientes en la forma en que se describió anteriormente. Para el método de MacLeod-Sugden se requiere, al menos, la densidad de la fase líquida.

Los parámetros formales de esta subrutina son los siguientes :

- NTIPO : Variable de control (1 : emplea método de MacLeod - Sugden, 2 : emplea estados correspondientes).
- NCOMP : Número de componentes.
- X : Fracción mol en fase líquida.
- Y : Fracción mol en fase vapor (si se tiene).
- T : Temperatura, °R.
- P : Presión, PSIA.
- RHOL : Densidad del líquido, para NTIPO = 1, en lb mol/ft³.
- RHOV : Densidad del vapor (si se tiene) para NTIPO = 1, en lb mol/ft³.
- SIGMA : Tensión superficial, din/cm o erg/cm².

Para correr esta subrutina se escribió un programa principal, cuyo listado aparece más adelante, y que puede hacer el cálculo por cualquiera de los dos métodos o por ambos (esto último si NTIP = 0), empleando, para el método de MacLeod-Sugden, la densidad del líquido

(NLG = 1) o la densidad del líquido y del vapor de la misma composición (NLG = 0), para un número indefinido (NCOND) de condiciones de presión y temperatura. Como resultado, se imprimen las densidades calculadas para el método de MacLeod-Sugden y la tensión superficial.

NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA

T E N S U P

- PCM : Presión pseudocrítica, PSIA.
- SUML : Promedio molar de paracoros para la fase líquida.
- SUMV : Promedio molar de paracoros para la fase vapor.
- TCM : Temperatura pseudocrítica, °R.
- WM : Promedio molar de factores acéntricos.

EJEMPLO DE CALCULO.

Esta subrutina se corrió para el cálculo de la tensión superficial del benceno puro a 120°C. El valor del paracoro del benceno es de 205.4 y el valor de la tensión superficial experimental es de 16.42 din/cm.

El cálculo por los dos métodos descritos anteriormente da errores dentro del rango reportado para cada uno de ellos : 4 % para el cálculo por el método de McLeod-Sugden y 2.6 % para el cálculo por estados correspondientes.

ES*RIOJLQ(1).TENSUPMAIN

```

1 1 FORMAT ('1',31X,12A6,/,51X,'CALCULO DE TENSION SUPERFICIAL',/,6
2 -4X,'DATOS',/,30X,'COMPONENTE',6X,'F. MOL',4X,'T. CR.',4X,'P. CR.',
3 -,4X,'V. CR.',4X,'F. AC.',3X,'PARACORO',/,56X,['G.R.'],'4X,['PSIA]
4 -[CUFT/LBMOL]',/,,(31X,2A6,F9.4,F10.2,F10.0,F10.2,F10.3,F10.2)/)
5 2 FORMAT (/,29X,'PRESION:',F7.2,' PSIA',29X,'TEMPERATURA:',F7.2,' G.
6 - F.',/)
7 3 FORMAT (29X,'DENSIDAD DE LIQUIDO:',F7.4,' LBMOL/CUFT, DENSIDAD DE
8 -VAPOR:',F6.4,' LBMOL/CUFT',/,29X,'TENSION SUPERFICIAL POR CORRELA
9 -CION DE MCLEOD-SUGDEN:',F6.2,' DIN/CM, ERG/CM2',/)
10 4 FORMAT (29X,'TENSION SUPERFICIAL POR ESTADOS CORRESPONDIENTES:',F
11 -10.2,' DIN/CM, ERG/CM2')
12 5 FORMAT (2A6,13X,2F6.0,F5.0,5X,F5.0,F6.1)
13 6 FORMAT (2I1,2I2,12A6)
14 7 FORMAT ( )
15 DIMENSION Z(20)
16 COMMON /PROPS/ COMP(2,20),PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(2
17 -0),FAC(20),KTR0L(20),PCOR(20) /CBWRS/ NLG1,NCOMP
18 NLG1 = 1
19 DIMENSION TITULO(12)
20 8 READ (5,6,END=13) NLG,NTIPO,NCOMP,NCOND,TITULO
21 DO 9 I=1, NCOMP
22 9 READ (5,5) COMP(1,I),COMP(2,I),TC(I),PC(I),VC(I),FAC(I),PCOR(I)
23 READ (5,7) P, TF, (Z(I), I=1, NCOMP)
24 WRITE (6,1) TITULO,(COMP(1,I),COMP(2,I),Z(I),TC(I),PC(I),VC(I),FA
25 -C(I),PCOR(I),I=1,NCOMP)
26 IF (NTIPO .LE. 1) CALL BWRS
27 DG = 0
28 ICOND = 1
29 10 WRITE (6,2) P, TF
30 IF (NTIPO .GE. 2) GO TO 11
31 CALL DENFUG (Z, P, TF+459.67, DL, Z, 1, 1)
32 IF (NLG .LE. 0) CALL DENFUG (Z, P, TF+459.67, DG, Z, 2, 2)
33 IF (ABS(DG/DL - 1.) .LE. 1E-3) GO TO 11
34 CALL TENSUP (1, NCOMP, Z, Z, TF+459.67, P, DL, DG, SIGMA)
35 WRITE (6,3) DL, DG, SIGMA
36 IF (NTIPO .EQ. 1) GO TO 12
37 11 CALL TENSUP (2, NCOMP, Z, Z, TF+459.67, P, DL, DG, SIGMA)
38 WRITE (6,4) SIGMA
39 12 IF (ICOND .GE. NCOND) GO TO B
40 ICOND = ICOND + 1
41 READ (5,7,END=13) P, TF
42 GO TO 10
43 13 STOP
44 END

```

ES*RIOJLQ(1).TENSUP

```

1  SUBROUTINE TENSUP (NTIPO, NCOMP, X, Y, T, P, RHOL, RHOV, SIGMA)
2  COMMON /PROPS/ COMP(2,20),PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(
3  -),W(20),KTROL(20),PCOR(20)
4  DIMENSION X(20), Y(20)
5  IF (NTIPO - 2) 1, 3, 1
6  1 SUML = 0.
7  SUMV = 0.
8  DO 2 I=1, NCOMP
9  IF (X(I) .GT. 0.) SUML = X(I)*PCOR(I) + SUML
10 2 IF (RHOV.GT.0.0 .AND. Y(I).GT.0.) SUMV = Y(I)*PCOR(I) + SUMV
11 SIGMA = ((RHOL*SUML - RHOV*SUMV)*1.6018E-2)**4
12 RETURN
13 3 TCM = 0.
14 PCM = 0.
15 WM = 0.
16 DO 4 I=1, NCOMP
17 IF (X(I) .LE. 0.) GO TO 4
18 TCM = X(I)*TC(I) + TCM
19 PCM = X(I)*PC(I) + PCM
20 WM = X(I)*W(I) + WM
21 4 CONTINUE
22 SIGMA = (1. - T/TCM)**1.222222*(PCM*PCM*TCM)**0.3333333*((WM -
23 -.242)*8.977E-2 + 8.906E-2)
24 RETURN
25 END

```

EJEMPLO BENCENO PURO (TENS. EXP.: 16.42)

CALCULO DE TENSION SUPERFICIAL

DATOS

COMPONENTE	F. MOL	T. CR. [G.R.]	P. CR. [PSIA]	V. CR. [CUFT/LBMOL]	F. AC.	PARACORO
BENCENO	1.0000	1012.00	714.	4.16	.215	205.40

PRESION: 14.70 PSIA

TEMPERATURA: 248.00 G. F.

DENSIDAD DE LIQUIDO: .6075 LBMOL/CUFT. DENSIDAD DE VAPOR: .0020 LBMOL/CUFT

TENSION SUPERFICIAL POR CORRELACION DE MCLFOD-SUGDEN: 15.75 DIN/CM. ERG/CM²TENSION SUPERFICIAL POR ESTADOS CORRESPONDIENTES: 16.00 DIN/CM. ERG/CM²

CAPITULO IX

PROGRAMA TERMOPROPS.

Como parte final de esta sección de propiedades se presenta un programa que ilustra el empleo de todas las subrutinas expuestas en los capítulos anteriores. Dependiendo de la información disponible, el programa puede calcular densidad, viscosidad, capacidad calorífica, entalpía y conductividad térmica para fase líquida o gaseosa, presión de vapor, entalpía de vaporización y tensión superficial para fase líquida, así como equilibrio líquido-vapor con temperatura y presión especificadas, con las propiedades correspondientes de cada fase.

Para este último cálculo se hace empleo de una subrutina adicional para el cálculo de la presión de convergencia de la mezcla. Con esta presión de convergencia y la subrutina EQUIL se obtiene la composición y proporción de ambas fases. Estos resultados se corrigen hasta que la fugacidad de los componentes en las dos fases se iguale.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA.

Debido a que ya se han descrito casi todos los cálculos involucrados, aquí sólo se tratará prácticamente del cálculo para el equilibrio líquido-vapor.

En general, los potenciales químicos de cualquier componente en todas las fases de un sistema multicomponente son idénticos en el equilibrio (1), y, puesto que la fugacidad de un componente está relacionada directamente con el potencial químico por la relación :

$$(d\mu_i = R T d \ln f_i)_T$$

la fugacidad puede emplearse también como criterio de equilibrio en tre fases. Para el caso de una fase líquida y una fase vapor, esto significa que :

$$f_i^V = f_i^L$$

para todos los componentes.

La fugacidad de los componentes depende, además de la temperatura y presión, de la composición de la fase considerada, la que, a su vez, depende de las fugacidades de los componentes a través de las constantes de equilibrio, lo que da lugar a un proceso iterativo. El método empleado es el sugerido por Starling (2), que se puede resumir como sigue :

- 1.- Inicialmente se suponen constantes de equilibrio.
- 2.- Se calcula fracción vaporizada y composición de ambas fases (calculo flash).
- 3.- Se calcula la fugacidad de los componentes en ambas fases.
- 4.- Si las fugacidades de cada componente en la fase líquida y en la fase vapor coinciden dentro de cierta tolerancia, se termina el cálculo de equilibrio, si no, se prosigue con el inciso 5.
- 5.- Se estiman nuevas constantes de equilibrio según :

$$K_i \text{ NUEVA} = K_i \frac{f_i L}{f_i V}$$

y se vuelve al inciso 2.

La suposición inicial de constantes de equilibrio se hace empleando la subrutina EQUIL descrita en el capítulo 5. La presión de convergencia, que es la presión a la cual las constantes de equilibrio de todos los componentes se hacen la unidad, se estima a partir de la ecuación de Kreglewski (3), válida para mezclas binarias :

$$P_C = P_S + P_S (5.808 + 4.93 \omega) \cdot \frac{T_C - T_S}{T_S} W \quad (1)$$

donde :

$$P_S = \sum_{i=1}^2 X_i P_{Ci}$$

$$T_S = \sum_{i=1}^2 X_i T_{Ci}$$

$$= \sum_{i=1}^2 X_i \omega_i$$

$$X_i = x_i / (x_1 + x_2)$$

La temperatura crítica de la mezcla se calcula como :

$$T_C = \sum_{i=1}^2 \theta_i T_{Ci}$$

donde :

$$W = 2.23 - 8.65 \omega + 12.42 \omega^2$$

$$\theta_i = X_i V_{ci} / V_c$$

$$V_c = \sum_{i=1}^2 X_i V_{ci}$$

x_i : Fracción mol del i ésimo componente en el líquido.

T_{ci} : Temperatura crítica del i ésimo componente.

V_{ci} : Volumen crítico del i ésimo componente.

P_{ci} : Presión crítica del i ésimo componente.

ω_i : Factor acéntrico del i ésimo componente.

La ecuación 1 se reduce a la original de Kreglewski para $W = 1$. Para la aplicación de esta ecuación la mezcla multicomponente se separa en dos grupos : aquéllos con temperatura crítica menor que la de operación (ligeros) y aquéllos con temperatura crítica mayor que la de operación (pesados). Los dos componentes más ligeros del grupo de ligeros se tratan como una mezcla binaria con fracciones mol de líquido proporcionales a sus fracciones totales en la mezcla, determinándose su temperatura, presión y volumen críticos, así como su factor acéntrico con las ecuaciones anteriores. Esta mezcla binaria se trata como un seudocomponente y se combina con el siguiente componente menos ligero según las ecuaciones anteriores para dar un nuevo seudocomponente, hasta agotar todo el grupo de ligeros.

Se sigue el mismo procedimiento con el grupo de pesados, comenzando esta vez por los dos más pesados y recombinando con el siguiente

menos pesado. Al final se tendrá sólo un seudocomponente pesado y un seudocomponente ligero, los cuales forman una mezcla seudobinaria, cuya presión de convergencia se calcula con la ec (1), donde :

$$X_1 = \frac{V_{cp} (T - T_{cp})}{V_{cl} (T_{cl} - T) + V_{cp} (T - T_{cp})}$$

$$X_2 = 1 - X_1$$

donde T es la temperatura de operación y los subíndices l y p se refieren al pseudocomponente ligero y pesado, respectivamente.

Este procedimiento se modifica cuando se tiene alguno de los dos casos siguientes :

1. - Sólo hay tres componentes en la mezcla. En este caso, el seudocomponente pesado lo forman los dos más pesados sin importar el valor de la temperatura de operación en relación con las temperaturas críticas.
2. - Cuando el componente más ligero es metano y el componente más pesado tiene una temperatura crítica mayor que la del hexano (507.3°K), se le asignan al metano, para este cálculo, una temperatura crítica de 275°K y una presión crítica de 600 psia. Esto es para compensar parcialmente el hecho de que la presión crítica de mezclas binarias de metano y componentes más pesados que el hexano son más altas que las predichas por la ecuación de Kreglewski, y que, a temperaturas que se aproximan a la crítica

del metano, estas mezclas no existen en la region de dos fases.

La estimación de la fugacidad se hace empleando la ecuación de estado BWRS (2), ya expuesta anteriormente. La expresión empleada es :

$$\begin{aligned}
 RT \ln f_i &= RT \ln (\varphi RT x_i) + \varphi (B_0 + B_{0i}) RT \\
 &+ 2\varphi \sum_{j=1}^n x_j \left[-(A_{0i} A_{0j})^{1/2} (1 - k_{ij}) \right. \\
 &- \frac{(C_{0i} C_{0j})^{1/2}}{T^2} \cdot (1 - k_{ij})^3 + \frac{(D_{0i} D_{0j})^{1/2}}{T^3} \cdot (1 - k_{ij})^4 \\
 &- \left. \frac{(E_{0i} E_{0j})^{1/2}}{T^4} \cdot (1 - k_{ij})^5 \right] \\
 &+ \frac{3\varphi^2}{2} \left[(b^2 b_i)^{1/3} RT - (a^2 a_i)^{1/3} \right. \\
 &- \left. \frac{(d^2 d_i)^{1/3}}{T} \right] + \frac{3\varphi^5}{5} \left[(a^2 a_i)^{1/3} \right. \\
 &+ \left. \frac{(d^2 d_i)^{1/3}}{T} \right] + \frac{3\varphi^5}{5} \left(a + \frac{d}{T} \right) (a^2 a_i)^{1/3} \\
 &+ \frac{3(c^2 c_i)^{1/3} \varphi^2}{T^2} \left[\frac{1 - \exp(-\gamma \varphi^2)}{\gamma \varphi^2} \right. \\
 &- \left. \frac{\exp(-\gamma \varphi^2)}{2} \right] - \frac{2c}{\gamma T^2} \left(\frac{\gamma_i}{\gamma} \right)^{1/2} \\
 &\left[1 - \exp(-\gamma \varphi^2) \left(1 + \gamma \varphi^2 + \frac{1}{2} \gamma^2 \varphi^4 \right) \right]
 \end{aligned}$$

Esta expresión es evaluada por la subrutina BWRS (cap. II) cuando la variable de control NLG es menor o igual que cero.

El parámetro de interacción k_{ij} que aparece en la ecuación anterior, tiene relativamente poco efecto en la predicción de densidades y de variaciones de entalpía y entropía con la presión; sin embargo, para predicciones de equilibrio su efecto es significativo (2), siendo preferible utilizar los valores experimentales cuando sea posible, sobre todo teniendo en cuenta que estos valores experimentales se determinan a partir de datos de equilibrio líquido-vapor. Debido a esto, en este programa se deja la opción de leer este parámetro.

DESCRIPCION DEL PROGRAMA.

Como se dijo antes, el programa TERMOPROPS hace el cálculo de propiedades a temperatura y presión especificadas por el usuario para fase líquida o gaseosa, así como el cálculo de equilibrio líquido-vapor con las propiedades de ambas fases.

Las opciones de cálculo dependen primordialmente de la información existente y son las siguientes :

1. - Cálculo de densidad, viscosidad, desviación isotérmica de entalpia, desviación isotérmica de entropia.
2. - Cálculo de la capacidad calorífica y entalpia real (ref. gas ideal a 0 psia y 25°C), además de las propiedades de la opción 1.
3. - Conductividad térmica, además de las propiedades de la opción 1.
4. - Esta opción incluye las otras tres.

Estas opciones son válidas para fase líquida, fase vapor, o cálculo de equilibrio. Con excepción del cálculo para cuando se especifica sólo vapor, es posible calcular también tensión superficial, presión de vapor y entalpia de vaporización para todas las opciones.

Todos los cálculos emplean las subrutinas expuestas en los capítulos anteriores. En el caso de equilibrio, este cálculo precede, naturalmen

te, al cálculo de propiedades. La subrutina CONVER emplea la ecuación de Kreglewski modificada, ordenando los componentes del más ligero al más pesado por sí sola, no siendo necesario proporcionarlos en orden.

La opción de lectura de parámetros de interacción ha sido incluida en la subrutina BWRS, efectuándose el control mediante la variable lógica IK; si ésta es verdadera, se lee el parámetro de interacción. Esta variable ha sido añadida al COMMON/CBWRS/ antes del parámetro de interacción. Nótese que en el programa principal esta variable es entera, y que se aprovecha aquí el hecho de que la representación interna de la constante lógica .TRUE. es la misma que la del número 1 entero, sucediendo lo mismo con la constante .FALSE. y el cero. Más aún, puesto que al determinar si una variable lógica es verdadera o falsa sólo se examina el bit menos significativo, la subrutina BWRS leerá el parámetro de interacción cuando a IK se le asigne un número impar en el programa principal y no lo leerá en caso contrario.

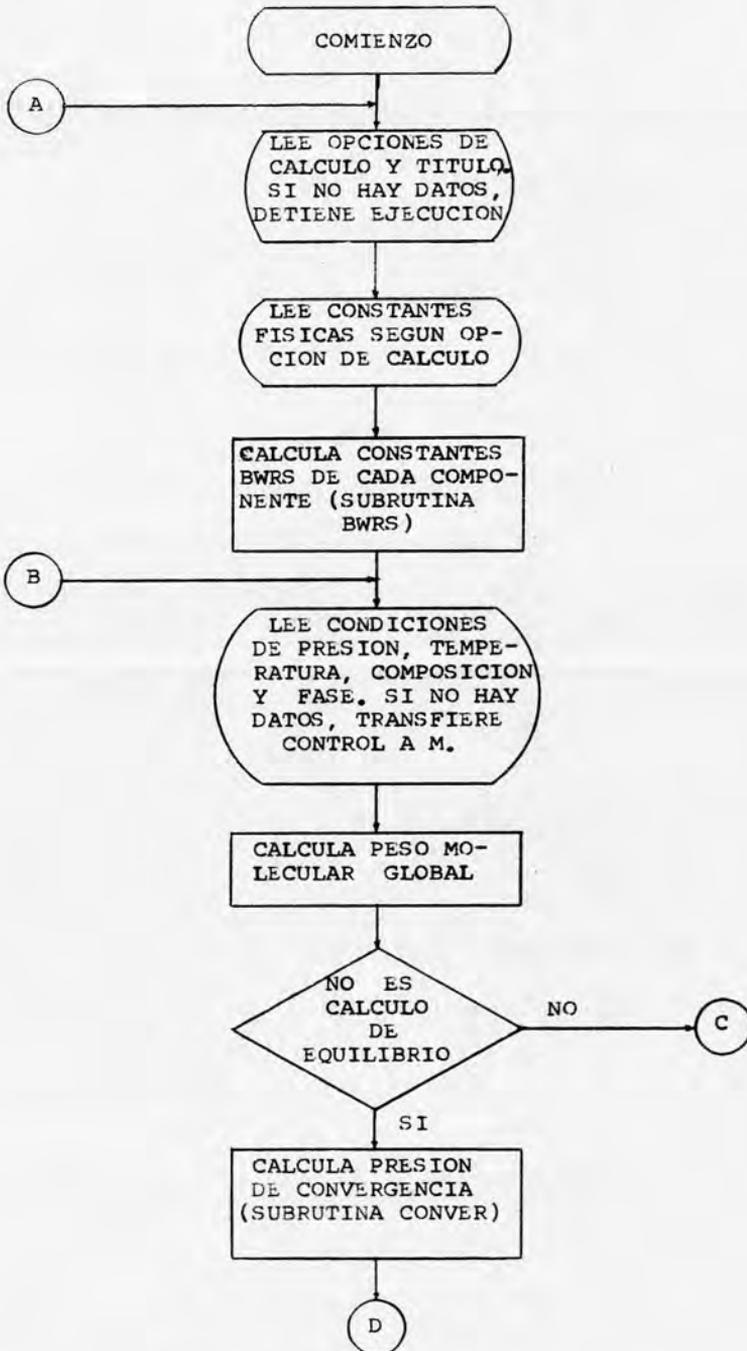
Los resultados que imprime el programa son, además de los datos leídos en la entrada :

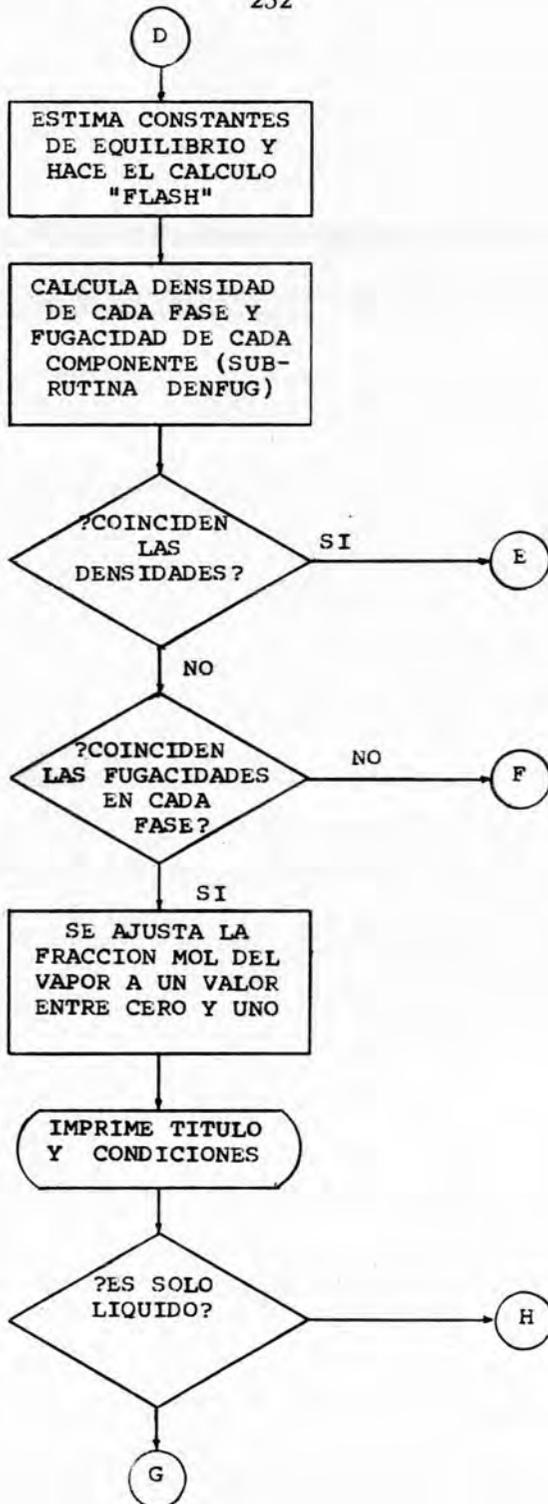
- La identificación del problema.
- La presión y temperatura de operación, así como la fracción mol de vapor.
- La composición. En el caso de equilibrio, la composición inicial

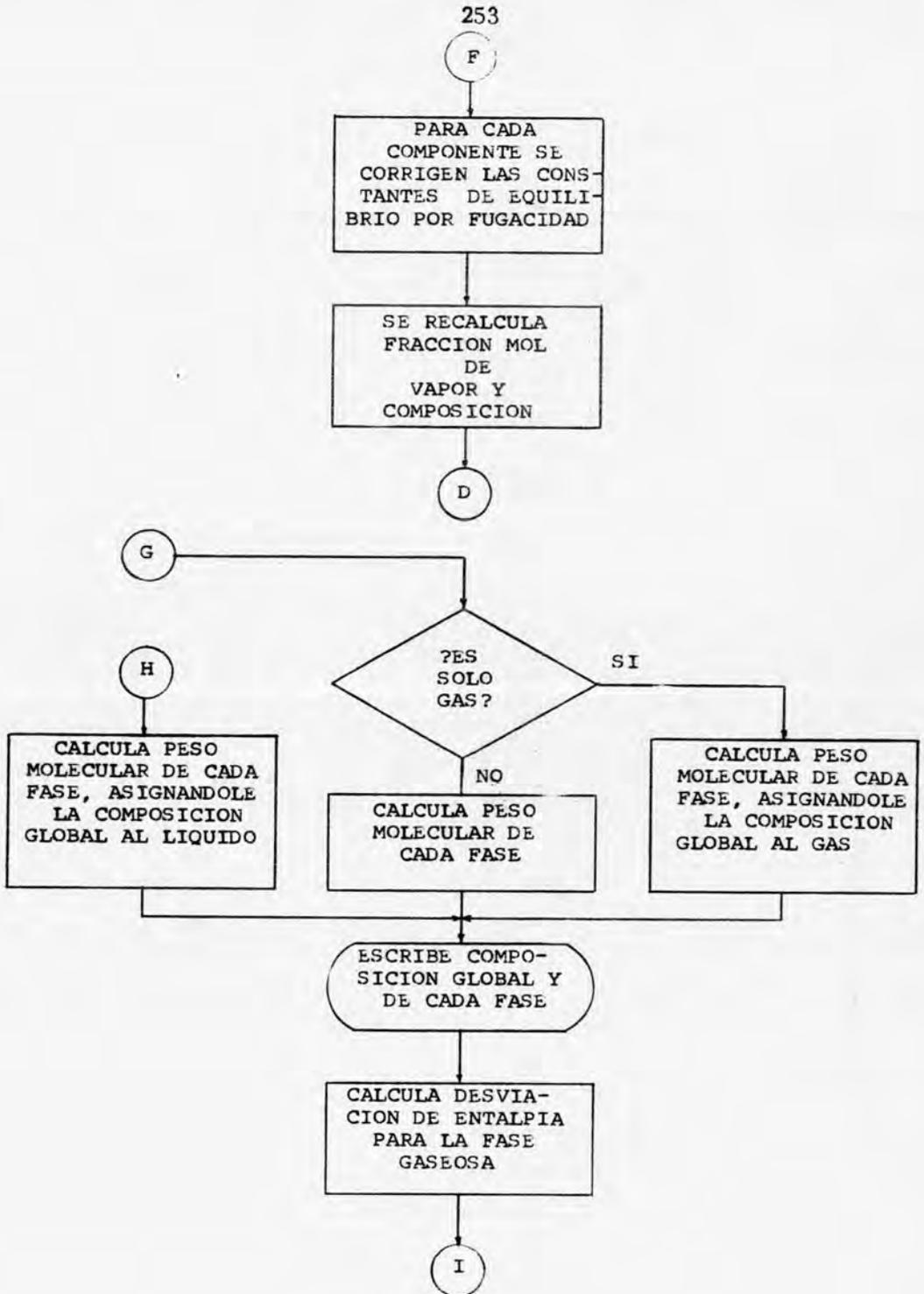
y las calculadas para cada fase.

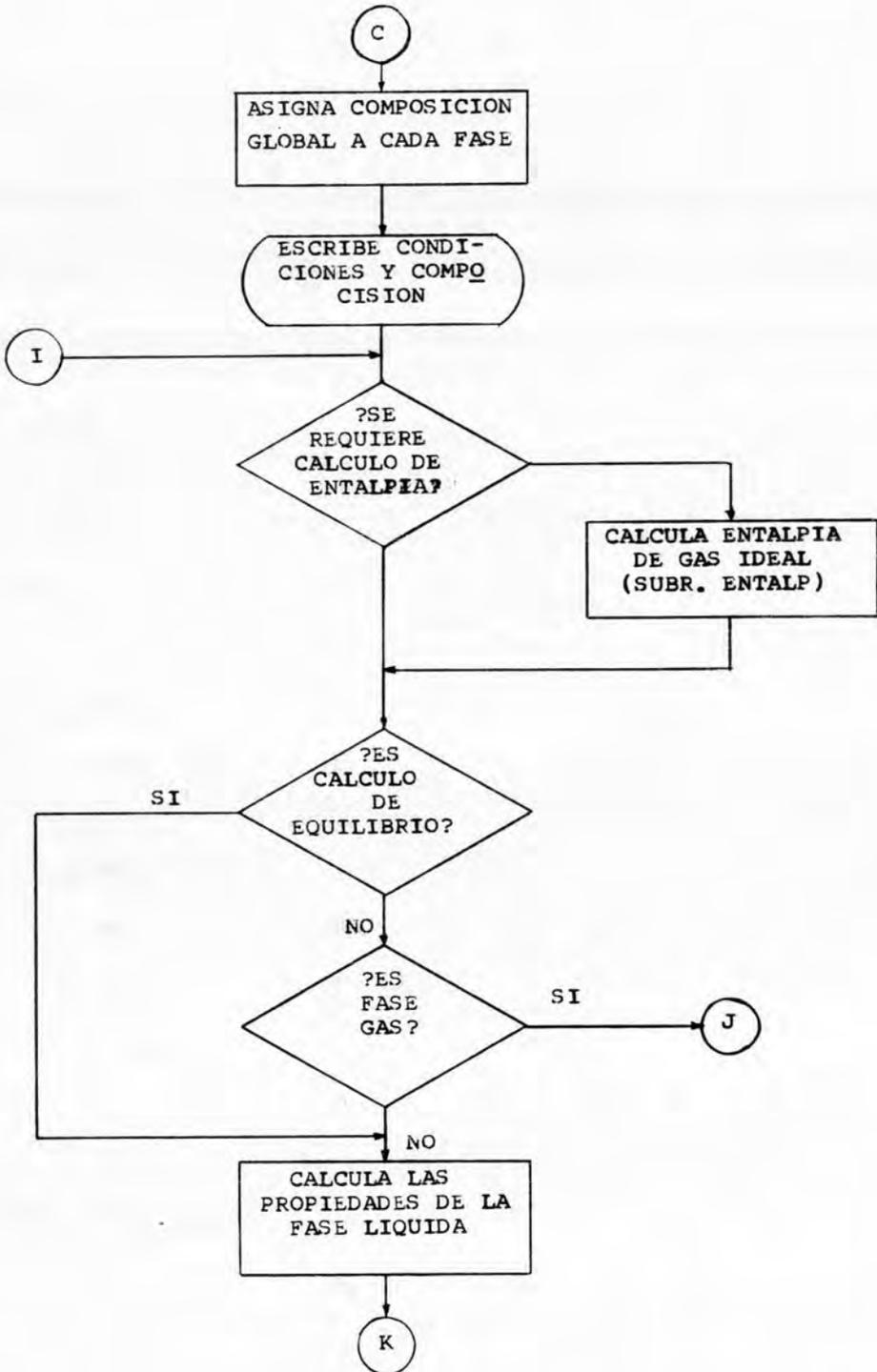
- La densidad, peso molecular, viscosidad, desviación isotérmica de entalpia, desviación isotérmica de entropia.
- La entalpia real y la capacidad calorífica, si es la opción 2 o 4.
- La conductividad térmica, si es opción 3 o 4.
- La tensión superficial, presión de vapor y entalpia de vaporización, en caso de haberse calculado.
- Constantes de Othmer, si es que se empleó este método, para aquellos componentes para los que no se hayan especificado.

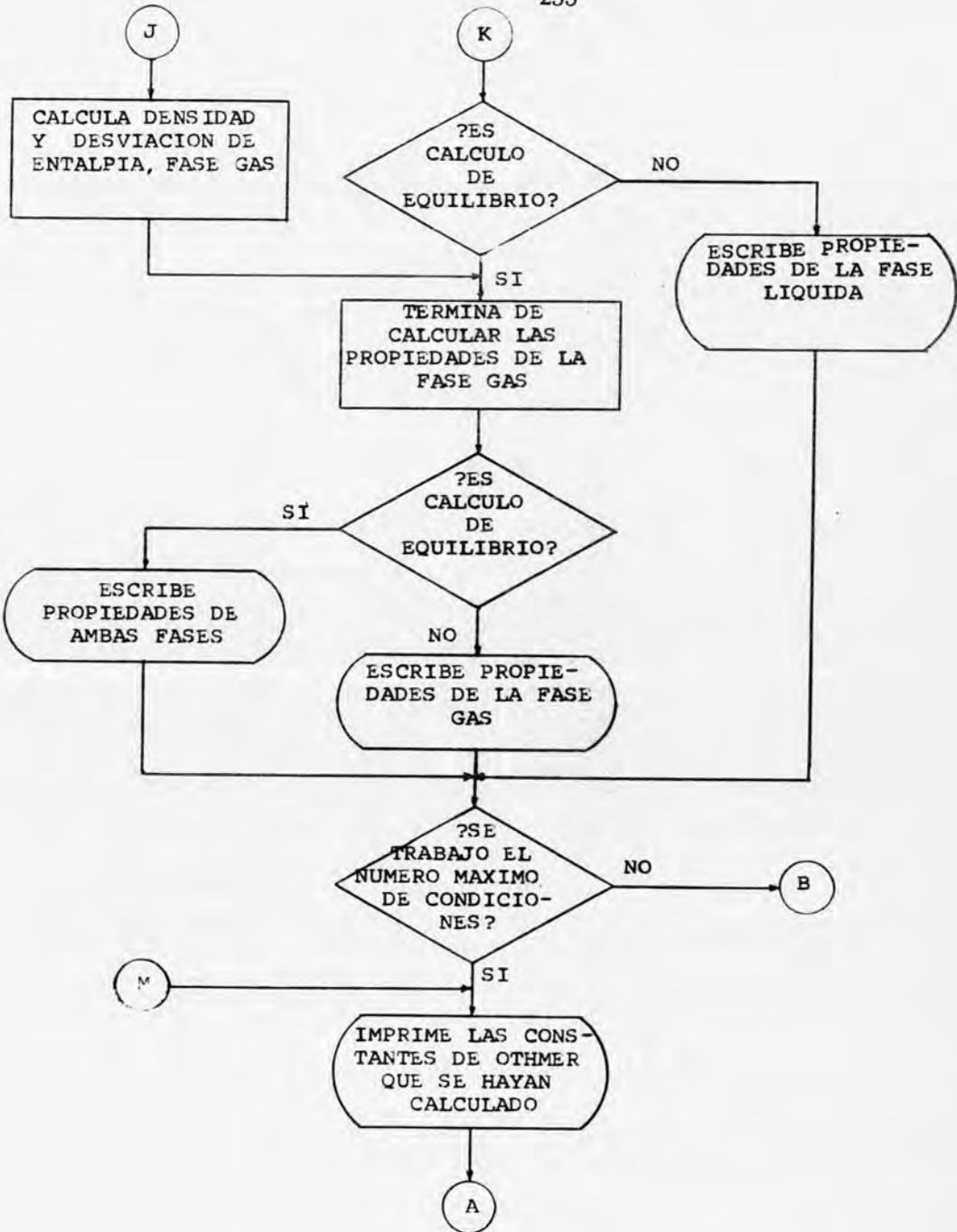
Estos valores se dan para cada fase, en el caso de equilibrio líquido-vapor.

PROGRAMA TERMOPROPS
DIAGRAMA DE BLOQUES











ENTRADA DE DATOS.

Los datos necesarios para el programa TERMOPROPS son los siguientes :

En la primera tarjeta :

- NCALC : Opción de cálculo, como se explicó antes. El valor cero equivale a la opción 1; un valor mayor de cuatro equivale a la opción cuatro. La especificación de lectura es I 1.
- IK : Control para lectura de parámetros de interacción experimentales. Si es 1, lee parámetros; si es 0, no los lee. Especificación I 1.
- NTVAP : Control para subrutina ECVAP. Si es 1, calcula presión de vapor por método de Riedel. Si es 2, calcula presión de vapor y entalpía de vaporización por método de Othmer. Si es cero o no existe fase líquida, no se efectúa ninguno de estos cálculos. La especificación es también I 1.
- NTENS : Control para subrutina TENSUP. Si su valor es 1, calcula la tensión superficial empleando el paracoro. Si es 2, calcula la tensión superficial por el método de estados correspondientes. Si vale cero o no existe fase líquida, no se calcula tensión superficial. Especificación I 1.
- NCOMP : Número de componentes; especificación I 2.
- NCOND : Número de condiciones de presión, temperatura y compo

sición que se desea correr. Este control es necesario para distinguir entre diferentes juegos de datos y representa, en realidad, el número de veces que ha de leerse el NAMELIST/COND/. Si su valor es cero, el programa le asigna el valor de 100. La especificación de lectura es I 2.

TITULO : Identificación del cálculo, con especificación 12A 6, es decir, hasta el fin de la tarjeta.

En la segunda tarjeta :

- COMP : Identificación del compuesto química de que se trate. Especificación 2 A 6.
- PM : Peso molecular del componente. Especificación F 7.2.
- TB : Temperatura de ebullición normal del componente, °R. Especificación F 6.0.
- TC : Temperatura crítica, en °R. Especificación F 6.0.
- PC : Presión crítica del componente, en PSIA. Especificación F 6.0.
- VC : Volumen crítico del componente, en $\text{ft}^3/\text{lb mol}$. Especificación F 5.0.
- ZC : Factor de compresibilidad crítico. Especificación F 5.0.
- W : Factor acéntrico; especificación F 5.0.
- PCOR : Paracoro. Especificación F 6.1.
- CS : Constante de Souders. Especificación F 6.1.

- KTROL : Variable de control para la subrutina VISC (1 : componente no polar; 2 : componente polar con puentes de hidrógeno; 3 : componente polar sin puentes de hidrógeno). Especificación F 2.0.
- CF : Calor de formación a 25°C del componente en fase gaseosa, en kcal/g-mol. Especificación F 8.3.
- HV 25 : Entalpia de vaporización a 25°C, en cal/g. Especificación F 6.2.

En la tercera tarjeta (se lee sólo si NCALC es dos o cuatro), se leen las constantes de la capacidad calorífica para la fase vapor y la fase líquida. Se supone aquí un polinomio de hasta tercer grado que proporciona, para el gas, el Cp molar en función de la temperatura en °K; para el líquido, el Cp por unidad de masa en función de la temperatura en °K.

- AG : Término independiente para la fase gas; especificación F 8.5.
- BG : Coeficiente del término de primer grado, fase gas; especificación F 9.7.
- CG : Coeficiente del término de segundo grado, fase gas, especificación E 11.4.
- DG : Coeficiente del término de tercer grado, fase gas; especificación E 11.4.
- AL : Término independiente para la fase líquida. Especificación

F 8.6.

- BL : Coeficiente del término de primer grado para la fase lí
quida. Especificación F 10.8.
- CL : Coeficiente del término de segundo grado para la fase lí
quida. Especificación E 11.5.
- DL : Coeficiente del término de tercer grado para la fase líqu
da. Especificación E 11.5.

En la cuarta tarjeta (sólo si NCALC vale tres o cuatro), se codifican las constantes para la conductividad térmica considerando polinomios de segundo grado con la conductividad en cal/(seg-cm-°K) expresada en función de la temperatura en °K; además, se codifican las constantes de M y C del método de Othmer (cap. VII).

- AKG, BKG: Constantes de la conductividad térmica para la fase gaseo
sa. Especificación 3 E 11.5.
- AKL, BKL: Constantes de la conductividad térmica para la fase líqu
da. Especificación 3 E 11.5.
- CKL : Constante de Othmer. Especificación F 7.4.
- C : Constante de Othmer. Especificación F 7.4.

Si no se tienen los valores de los parámetros de Othmer, se deja el espacio en blanco. Para todos aquellos componentes cuyos parámetros no hayan sido especificados se harán los cálculos necesarios a partir de dos puntos experimentales : el punto de ebullición normal y el puno

to crítico, imprimiéndose al final los parámetros calculados. (Cap. VII, método de Othmer).

Debe perforarse un juego de tarjetas como la segunda, tercera y cuarta por cada componente que se tenga en la mezcla.

En la siguiente tarjeta se codifican los parámetros de interacción entre los componentes para la ecuación BWRS (esta tarjeta se lee o no dependiendo del valor de IK).

(K (I-1, J), J = 1, NCOMP), I = 2, NCOMP) :

Parámetro de interacción del primer componente con todos los demás, del segundo con todos menos el primero, del tercero con todos menos el primero y el segundo, etc. Por ejemplo : si el número de componentes es 4, se perforan K (1, 2), K (1, 3), K (1, 4), K (2, 3), K (2, 4), y K (3, 4). Los que se desconozcan se dan como cero para que el programa los estime. La especificación es formato libre.

La siguiente tarjeta se perfora empleando especificación de NAMELIST. El nombre del NAMELIST es COND y las variables asociadas con él son :

NLG : Variable de control (1 : fase líquida; 2 : fase vapor; 0 : cálculo de equilibrio).

P : Presión en PSIA.

- T : Temperatura, en °F.
Z : Vector de fracciones mol.

El NAMELIST/COND/ permite modificar cada vez alguna de estas variables sin necesidad de redefinir las demás. Es válido, también, definir la fracción mol de algunos componentes como cero, haciendo, de esta manera, que el programa los ignore para ese cálculo. Esta tarjeta se lee hasta encontrar el fin del archivo de datos (lo cual da terminación normal al programa) o hasta NCOND veces, después de lo cual el programa buscará otra tarjeta del tipo de la primera para iniciar un nuevo juego de datos, o terminará ejecución por fin de archivo de datos.

NOMENCLATURA DEL PROGRAMA

TERMOPROPS

- CEQ : Vector de constantes de equilibrio.
- CPGAS : Capacidad calorífica molar de la fase gaseosa.
- CPLIQ : Capacidad calorífica molar de la fase líquida.
- CTE : Matriz que contiene las constantes BWRS de los componentes puros.
- CTEM : Vector que contiene los parámetros BWRS de mezcla.
- DENS : Vector de densidades, auxiliar en el cálculo de viscosidad para la fase líquida, en lb mol/ft³.
- DHG : Desviación de entalpía de la fase gaseosa, con respecto a la del gas ideal a la misma temperatura, en BTU/lb mol.
- DHL : Desviación de entalpía de la fase líquida, con respecto a la del gas ideal a la misma temperatura, en BTU/lb mol.
- DK : Corrección por alta presión para la conductividad térmica de gases, en cal/(seg-cm-°K).
- DSG : Desviación de entropía de la fase gaseosa, con respecto a la del gas ideal a la misma temperatura, en BTU/(lb mol °R).
- DSL : Desviación de entropía para la fase líquida con respecto a la del gas ideal a la misma temperatura, en BTU/(lb mol °R).
- FC : Factor de compresibilidad.

- FL : Vector de logaritmos naturales de las fugacidades de los componentes en la fase líquida.
- FV : Vector de logaritmos naturales de las fugacidades de los componentes en la fase vapor.
- FVAP : Fracción mol de vapor.
- HL : Entalpía real de la fase líquida, con respecto a los elementos a 25°C y 0 atm, en BTU/lb mol.
- HV : Entalpía real de la fase vapor con respecto a los elementos a 25°C y 0 atm, en BTU/lb mol.
- HVAP : Entalpía de vaporización de la fase líquida, en BTU/lb mol.
- ICOND : Número de la condición de presión, temperatura, etc., que se está calculando.
- IK : Variable de control para la lectura de parámetros de interacción.
- KG : Conductividad térmica del gas, a baja presión, en cal/(seg-cm-°K).
- KGC : Conductividad térmica del gas, corregida por presión, en cal/(seg-cm-°K).
- KGC 1 : Conductividad térmica del gas, corregida por presión, en BTU/(hr-ft-°R).
- KL, KLC : Conductividad térmica del líquido, en cal/(seg-cm-°K).
- KLC 1 : Conductividad térmica del líquido, en BTU/(hr-ft-°R).
- MU : Vector de viscosidades de los componentes, en centipoises, útil en el cálculo de conductividades para la fase vapor.

- MUG : Viscosidad de la fase gaseosa, en centipoises.
- MUL : Viscosidad de la fase líquida.
- NCALC : Variable de control : su valor define la opción.
- NCOMP : Número total de componentes.
- NCOND : Número de condiciones de presión, temperatura, etc.
- NLG : Variable de control de fase.
- NLG 1 : Variable de control de cálculo de fugacidades.
- NLG 2 : Variable auxiliar de control de fase.
- NORD : Variable de control para subrutina CONVER : NORD = 1 determina orden de componentes según su temperatura crítica; NORD = 2, este orden ya fue determinado.
- NTENS : Variable de control de cálculo de tensión superficial.
- NTVAP : Variable de control de cálculo de presión de vapor y entalpía de vaporización.
- P : Presión absoluta, PSIA.
- PCONV : Presión de convergencia, PSIA.
- PMG : Peso molecular de la fase gaseosa.
- PML : Peso molecular de la fase líquida.
- PMT : Peso molecular global.
- PV : Matriz de presiones de vapor experimentales, útil cuando no se conocen las constantes de Othmer, en mm de Hg.
- PVAP : Presión de vapor, PSIA.
- RHOG : Densidad de la fase vapor, lb mol/ft³.
- RHOL : Densidad de la fase líquida, lb mol/ft³.

- SIGMA : Tensión superficial, din/cm .
- T : Temperatura, $^{\circ}\text{F}$.
- TA : Temperatura, $^{\circ}\text{R}$.
- TITULO : Identificación del cálculo.
- TV : Matriz de temperaturas a las que se conocen las presiones de vapor experimentales; útil cuando no se conocen las constantes de Othmer, en $^{\circ}\text{F}$.
- V : Fracción mol final de vapor.
- X : Vector de fracciones mol para la fase líquida.
- Y : Vector de fracciones mol para la fase vapor.
- Z : Vector de fracciones mol globales.

EJEMPLO DE CALCULO.

Como ejemplo se presenta aquí el cálculo de equilibrio líquido-vapor para una mezcla de 61.63 % en mol de metano, 22.22 % de propano y 16.15 % de n-heptano, para la cual se tienen los siguientes valores experimentales (2), a -20°F y 600 psia.

	X	Y
METANO	.2730	.9595
PROPANO	.4040	.0405
n-HEPTANO	.3230	.0000

En las páginas que siguen se muestra el listado de resultados (opción 2), empleando la regresión para los once parámetros de la ecuación para cada componente y los valores experimentales de los parámetros de interacción entre componentes. El error relativo máximo es de 6.9 %, siendo el promedio de 1.3 %. En ningún caso el error absoluto fue mayor de 3×10^{-3} . Los valores de los parámetros de interacción fueron (2) :

Metano - propano	:	2.3×10^{-2}
Metano - n-heptano	:	6.0×10^{-2}
Propano - n-heptano	:	6.5×10^{-3}

Las constantes físicas de los componentes fueron tomadas de las referencias (4), (5), (6) y (7) y aparecen también en el listado de resultados.

ES*RIQULQ(1).TERMOPROP5

```

1 1 FORMAT (56X,'P R O P I E D A D E S',//,59X,'LIQUIDO',11X,'VAPOR',//
2 -//,36X,'DENSIDAD',F23.4,F16.4,' LB/MOL/FT3',//,36X,'PESO MOLECULAR',
3 -F17.2,F16.2,' LB/LBMOL',//,36X,'VISCOSIDAD',F21.4,F16.4,' CENTIPOI
4 -SE',//,36X,'DESV ISOT ENTALP',F15.2,F16.2,' BTU/LBMOL',//,36X,'DES
5 -V ISOT ENTROP',F15.4,F16.4,' BTU/(LBMOL GR)')
6 2 FORMAT (56X,'P R O P I E D A D E S',//,45X,'DENSIDAD',F23.4,' LRMO
7 -L/FT3',//,45X,'PESO MOLECULAR',F17.2,' LB/LBMOL',//,45X,'VISCOSIDA
8 -D',F21.4,' CENTIPOISE',//,45X,'DESV ISOT ENTALP',F15.2,' BTU/LBMOL
9 -',//,45X,'DESV ISOT ENTROP',F15.4,' BTU/(LBMOL GR)')
10 3 FORMAT (55X,'C O M P O S I C I O N',//,40X,'COMPONENTE',22X,'FRACC
11 -ION MOL',//,65X,'TOTAL',5X,'LIQUIDO',5X,'VAPOR',//,(40X,2A6,F18.4,2
12 -F11.4,/)
13 4 FORMAT ('0',29X,12A6,//,48X,'PRESION',F24.2,' PSIA',//,48X,'TEMPER
14 -ATURA',F20.2,' G. F.',//,48X,'FRACCION MOL DE VAPOR',F10.4,/)
15 5 FORMAT ('1',29X,12A6,//,62X,'D A T O S',//, 7X,'COMPONENTE',8X,'PM
16 -',9X,'TB',9X,'TC',6X,'PC',6X,'VC',6X,'ZC',4X,'FAC.',4X,'KT',5X,'P
17 -COR',6X,'CS',7X,'ΔHF',8X,'ΔHV',//,(/7X,2A6,F10.2,2F11.2,F7.0,F8.2,
18 -2F8.3,F6.0,2F9.1,F11.2,F10.2))
19 6 FORMAT (//,4X,'COMPONENTE',8X,'AG',12X,'BG',12X,'CG',12X,'DG',12X,
20 -'AL',12X,'BL',12X,'CL',12X,'DL',//,(/4X,2A6,1P6E14.6))
21 7 FORMAT (//,10X,'COMPONENTE',8X,'AKG',11X,'BKG',11X,'CKG',11X,'AKL'
22 -,11X,'BKL',11X,'CKL',11X,'M',7X,'C',//,(/10X,2A6,1P6E14.6,0P2F8.3))
23 8 FORMAT (//,36X,'COND. TERMICA',F18.4,F16.4,' BTU/(FT HR GR)')
24 9 FORMAT (//,36X,'ENTALPIA',F23.2,F16.2,' BTU/LBMOL',//,36X,'CP',F29.
25 -4,F16.4,' BTU/(LBMOL GR)')
26 10 FORMAT (//,45X,'ENTALPIA',F23.2,' BTU/LBMOL',//,45X,'CP',F29.4,' BT
27 -U/(LBMOL GR)')
28 11 FORMAT (55X,'C O M P O S I C I O N',//,51X,'COMPONENTE',9X,'FRACCI
29 -ON MOL',//,(51X,2A6,F18.4,/)
30 12 FORMAT (//,45X,'TENSION SUPERFICIAL',F12.2,' DIN/CM, ERG/CM2')
31 13 FORMAT (//,45X,'PRESION DE VAPOR',F15.4,' PSIA')
32 14 FORMAT (//,45X,'COND. TERMICA',F18.4,' BTU/(FT HR GR)')
33 15 FORMAT (//,51X,'SE TIENE LIQUIDO SATURADO')
34 16 FORMAT (//,52X,'SE TIENE VAPOR SATURADO')
35 17 FORMAT (2A6,F7.2,3F6.0,2F6.1,F2.0,F8.0,F6.2)
36 18 FORMAT (4I1,2I2,12A6)
37 19 FORMAT (6F11.0,2F7.0)
38 20 FORMAT (F8.5,F9.7,2F11.4,F8.6,F10.0,2F11.5)
39 57 FORMAT ('1',45X,'CONSTANTES CALCULADAS EN SUBROUTINA ECVAP',//,51X,
40 -'COMPONENTE',9X,'M',7X,'C')
41 61 FORMAT ('0',50X,2A6,F10.3,F8.3)
42 21 FORMAT (//,/' SOLO UNA DENSIDAD EN BWRS:',F7.4,' LBMOL/FT3 - SUSPE
43 -NDE CALCULO FLASH')
44 62 FORMAT (//,36X,'TENSION SUPERFICIAL',F12.2,17X,'DIN/CM, ERG/CM2')
45 53 FORMAT (//,36X,'CALOR LAT VAP',F18.2,17X,'BTU/LBMOL')
46 65 FORMAT (//,36X,'PRESION DE VAPOR',F15.4,17X,'PSIA')
47 54 FORMAT (//,45X,'CALOR LAT VAP',F18.2,' BTU/LBMOL')
48 56 FORMAT ('1')
49 51 FORMAT ( )
50 IMPLICIT REAL (K,M)
51 DIMENSION CEQ(20),FL(20),FV(20),MU(20),PV(20,2),TITULO(12),TV(20,2
52 -),X(20),Y(20),Z(20)
53 COMMON /PROPS/ COMP(2,20),PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20
54 -),W(20),KTROL(20),PCOR(20),CS(20),AG(20),BG(20),CG(20),DG(20),AL(2
55 -),BL(20),CL(20),DL(20),CF(20),AKG(20),BKG(20),CKG(20),AKL(20),BKL
56 -)(20),CKL(20),M(20),C(20),HV25(20)
57 COMMON /CBWRS/ NLG1,NCOMP,CTE(20,11),CTEM(11),IK /CVISC/ DENS(20)
58 NAMELIST /COND/NLG,T,H,Z
59 22 READ(5,18,END=49)NCLC,IK,NTVAP,NTENS,NCOMP,NCOND,TITULO
60 DO 63 I=1,NCOMP

```

```

61 READ(5,17)COMP(1,I),COMP(2,I),PM(I),TB(I),TC(I),PC(I),VC(I),ZC(I)
62 - ,W(I),PCOR(I),CS(I),KTROL(I),CF(I),HV25(I)
63 IF(NCALC.LE.1)GO TO 23
64 IF(NCALC.NE.3)READ(5,20)AG(I),BG(I),CG(I),DG(I),AL(I),BL(I),C
65 -L(I),DL(I)
66 IF(NCALC.LE.2)GO TO 23
67 READ(5,19)AKG(I),BKG(I),CKG(I),AKL(I),BKL(I),CKL(I),M(I),C(I)
68 IF(M(I).NE.0.)GO TO 63
69 23 IF(NTVAP.NE.2)GO TO 63
70 TV(1,1) = TB(I) - 459.69
71 TV(I,2) = TC(I) - 459.69
72 PV(1,1) = 760.
73 PV(I,2) = PC(I)*51.714752
74 M(I) = 0.
75 63 CONTINUE
76 WRITE(6,5)TITULO,(COMP(1,I),COMP(2,I),PM(I),TB(I),TC(I),PC(I),VC
77 - (I),ZC(I),W(I),KTROL(I),PCOR(I),CS(I),CF(I),HV25(I),I=1,NCOMP)
78 CALL BWR5
79 IF(NCALC.EQ.2 .OR. NCALC.GE.4) WRITE(6,6) (COMP(1,I),COMP(2,I),AG
80 - (I),BG(I),CG(I),DG(I),AL(I),BL(I),CL(I),DL(I),I=1,NCOMP)
81 IF(NCALC.GE.3)WRITE(6,7) (COMP(1,I),COMP(2,I),AKG(I),BKG(I),CK
82 - G(I),AKL(I),BKL(I),CKL(I),M(I),C(I),I=1,NCOMP)
83 IF(NCOND.LE.0)NCOND=100
84 NORD = 1
85 DO 48 ICOND=1,NCOND
86 READ(5,COND)END=64)
87 WRITE(6,56)
88 NLG2 = NLG
89 HV=0.
90 TA=T+459.69
91 PMT=0.
92 PMG=0.
93 PML=0.
94 DO 24 I=1,NCOMP
95 24 IF(Z(I).GT.0.)PMT = Z(I)*PM(I) + PMT
96 IF(NLG.GT.0)GO TO 37
97 NLG1 = 0
98 CALL CONVER(Z, NCOMP, TA, NORD, PCO(I,V)
99 IF(PCONV.LE.P)PCONV = 1.5*P
100 CALL EQUIL(Z, P, CEG, FVAP, X, Y, NCOMP, TA, PCONV)
101 25 CALL DENFUG(X,P,TA,RHOL,FL,0,1)
102 CALL DENFUG(Y,P,TA,RHOG,FV,0,2)
103 IF(ABS(RHOL/RHOG - 1.) .LT. 1E-3) GO TO 50
104 DO 26 I=1,NCOMP
105 IF(Z(I).LE.0.)GO TO 26
106 IF(ABS(FL(I)/FV(I)-1.0) .GT. 1E-3) GO TO 27
107 26 CONTINUE
108 V = AMAX1(AMIN1(1.0,FVAP),0.0)
109 WRITE(6,4) TITULO,P,T,V
110 IF(ABS(FVAP).LT.5E-5)WRITE(6,15)
111 IF(ABS(FVAP-1.0).LT.5E-5)WRITE(6,16)
112 IF(V)29,29,31
113 27 DO 28 I=1,NCOMP
114 IF(Z(I).LE.0.)GO TO 28
115 CEQ(I) = EXP(FL(I) - FV(I))*CEQ(I)
116 28 CONTINUE
117 CALL FLASH(Z, CEQ, FVAP, X, Y, NCOMP)
118 GO TO 25
119 29 PML=PMT
120 DO 30 I=1,NCOMP
121 X(I)=Z(I)

```

```

122 30 IF (Z(I) .GT. 0.) PMG = Y(I)*PM(I) + PMG
123   DO TO 30
124 31 IF (V-1.) 34,32,32
125 32 PMG=PMT
126   DO 33 I=1,NCOMP
127   Y(I)=Z(I)
128 33 IF (Z(I) .GT. 0.) PML = X(I)*PM(I) + PML
129   GO TO 36
130 34 DO 35 I=1,NCOMP
131   IF (Z(I) .LE. 0.) GO TO 35
132   PML=X(I)*PM(I)+PML
133   PMG=Y(I)*PM(I)+PMG
134 35 CONTINUE
135 36 WRITE(6,3)(COMP(1,I),COMP(2,I),Z(I),X(I),Y(I),I=1,NCOMP)
136   CALL ENT(TA,RHOG,DHG,DSG)
137   GO TO 38
138 37 V = NLG2 - 1
139   DO 39 I=1, NCOMP
140   Y(I) = Z(I)
141 39 X(I) = Z(I)
142   WRITE(6,4)TITULO,P,T,V
143   WRITE(6,11)(COMP(1,I),COMP(2,I),Z(I),I=1,NCOMP)
144 38 IF(NCALC.EQ.2,OR.NCALC.GE.4)CALL ENTALP(NCOMP,TA,X,X+2,F
145   -V,HV,HL)
146   NLG1 = 1
147   IF(NLG2.EQ.0)GO TO 40
148   IF(NLG2.EQ.2)GO TO 44
149   PML = PMT
150 40 CALL DENFUG(X,P,TA,RHOL,FL,0,1)
151   CALL ENT(TA,RHOL,DHL,DSL)
152   DO 42 I=1,NCOMP
153   IF (X(I) .LE. 0.) GO TO 42
154   DO 41 J=1,11
155 41 CTEM(J)=CTE(I,J)
156   CALL DENFUG(X,P,TA,DENS(I),FL,2,1)
157 42 CONTINUE
158   CALL VISC(NCOMP,X,TA,1,MU,MUL)
159   IF(NCALC.EQ.2,OR.NCALC.GE.4)CALL CPE, ID(NCOMP,TA,X,Y,1,FL,CPG
160   -AS,CPLIQ)
161   HL=HV+DHL
162   IF (NTVAP.NE.0) CALL ECVP(NTVAP,NCOMP,X,TA,PV,TV,FL,FV,PVAP,HVAP)
163   IF(NCALC.GE.3) CALL CONUC(NCOMP,X,TA,P,1,MU,FL,KL,DK,KLC,KLC1)
164   PVAP=1.9336842E-2*PVAP
165 43 IF (NTENS.NE.0) CALL TENSUP(NTENS,NCOMP,X,Y,TA,P,RHOL,RHOG,SIGMA)
166   IF(NLG2.EQ.0)GO TO 46
167   WRITE(6,2)RHOL,PMT,MUL,DHL,DSL
168   IF(NCALC.EQ.2,OR.NCALC.GE.4)WRITE(6,10) HL,CPLIQ
169   IF (NTENS.NE.0) WRITE(6,12) SIGMA
170   IF(NCALC.GE.3)WRITE(6,14)KLC1
171   IF (NTVAP.NE.0) WRITE (6,13) PVAP
172   IF (NTVAP.EQ.2) WRITE (6,14) HVAP
173   GO TO 48
174 44 PMG = PMT
175   CALL DENFUG(Y,P,TA,RHOG,FV,0,2)
176   CALL ENT(TA,RHOG,DHG,DSG)
177 46 CALL VISC (NCOMP,Y,TA,2,MU,MUG)
178   IF(NCALC.EQ.2,OR.NCALC.GE.4) CALL CPE, ID(NCOMP,TA,X,Y,2,F
179   -V,CPGAS,CPLIQ)
180   IF(NLG2.LE.0,AND.(NCALC.EQ.2,OR.NCALC.GE.4)) CALL ENTALP(NCOMP,TA,
181   -Y,Y+2,FV,HV,HL)
182   HV=HV+DHG

```

```

183       IF (NCALC.GE.3) CALL CONDDC(NCO:P,Y,TA,P,2,MU,FV,KG,DK,
184 -KGC,KGC1)
185       IF (NLG2.LQ.0) GO TO 47
186       WRITE (6,2) RHOG,PMG,MUG,DHG,DSG
187       IF (NCALC.EQ.2 .OR. NCALC.GE.4) WRITE (.,10) HV,CPGAS
188       IF (NCALC.GE.3) WRITE (6,14) KGC1
189       GO TO 48
190     47 WRITE (6,1) RHOL,RHOG,PML,PMG,MUL,MUG,JHL,DHG,DSL,DSG
191       IF (NCALC.EQ.2 .OR. NCALC.GE.4) WRITE (6,9) HL,HV,CPLIQ,CPGAS
192       IF (NCALC.GE.3) WRITE (6,8) KLC1,KGC1
193       IF (INTENS.NE.0) WRITE (6,62) SIGMA
194       IF (INTVAP.NE.0) WRITE (6,65) PVAP
195       IF (INTVAP.EQ.2) WRITE (6,53) HVAP
196       GO TO 48
197     50 WRITE (6,21) RHGL
198       NLG2 = AMAX1(AMIN1(FVAP, 1.), 0.) + 1
199       GO TO 37
200     48 CONTINUE
201     64 DO 58 J=1, NCOMP
202     58 IF (PV(J,1) .NE. 0.) GO TO 59
203         GO TO 22
204     59 WRITE (6,57)
205         DO 60 I=J, NCOMP
206             IF (PV(I,1) .EQ. 0.) GO TO 60
207             PV(I,1) = 0.
208             WRITE (6,61) COMP(1,I),COMP(2,I),N(I),C(I)
209     60 CONTINUE
210         GO TO 22
211     49 STOP
212     END

```

ES*RIQJL9(1).BWR5(0)

```

1  SUBROUTINE BWR5
2  4 FORMAT( )
3  DIMENSION X(20), F(20), A(11), B(11)
4  REAL K
5  LOGICAL IK
6  COMMON /CBWR5/NLG, NCOMP, B0(20), A0(20), C0(20), GAMA(20), B1(20), A1(20
7  -), ALFA(20), C1(20), D0(20), D1(20), E0(20), B0M, A0M, C0M, GAMA M, B1M, A1M, A
8  -LFAM, C1M, D0M, D1M, E0M, IK, K(20,20)
9  COMMON /PROPS/ COMP(2,20), PM(20), TB(20), TC(20), PC(20), VC(20), ZC(20
10 -), W(20)
11  DATA A/0.443690,1.28438,0.356306,0.544979,0.528629,0.484011,0.0705
12  -233,0.504087,0.0307452,0.0732828,0.006450/, B/0.115449,-0.920731,1
13  -.70871,-0.270896,0.349261,0.754130,-0.044448,1.32245,0.179433,0.46
14  -3492,-0.022143/, R/10.7315/
15  F3(A,B)=(A*A*B)**0.33333333
16  IF (NCOMP .LT. 2) GO TO 6
17  IF(IK) READ(5,4) ((K(I-1,J),J=I,NCOMP),I=2,NCOMP)
18  DO 5 I=2, NCOMP
19  L=I-1
20  DO 5 J=I,NCOMP
21  IF(.NOT. IK.OR. K(L,J).LE.0.0)
22  /K(L,J)=1.-8.*SQRT(VC(L)*VC(J))/(VC(L)**.333333+VC(J)**.333333)**3
23  5 K(J,L)=K(L,J)
24  6 DO 7 I=1, NCOMP
25  B0(I)=(A(1)+B(1)*W(I))*VC(I)
26  A0(I)=(A(2)+B(2)*W(I))*R*TC(I)*VC(I)
27  C0(I)=(A(3)+B(3)*W(I))*R*TC(I)**3*VC(I)
28  GAMA(I)=(A(4)+B(4)*W(I))*VC(I)**2
29  B1(I)=(A(5)+B(5)*W(I))*VC(I)**2
30  A1(I)=(A(6)+B(6)*W(I))*R*TC(I)*VC(I)**2
31  ALFA(I)=(A(7)+B(7)*W(I))*VC(I)**3
32  C1(I)=(A(8)+B(8)*W(I))*R*TC(I)**3*VC(I)**2
33  D0(I)=(A(9)+B(9)*W(I))*R*TC(I)**4*VC(I)
34  D1(I)=(A(10)+B(10)*W(I))*R*TC(I)**2*VC(I)**2
35  7 E0(I)=(A(11)+B(11)*W(I))*EXP(-3.8*W(I))*R*TC(I)**5*VC(I)
36  RETURN
37  ENTRY DENFUG (X, P, T, D, F, NCONT, LG)
38  IF (NLG.GT.0 .AND. NCONT.GT.1) GO TO 10
39  B0M=0.0
40  A0M=0.0
41  C0M=0.0
42  GAMA M=0.0
43  B1M=0.0
44  A1M=0.0
45  ALFAM=0.0
46  C1M=0.0
47  D0M=0.0
48  D1M=0.0
49  E0M=0.0
50  DO 9 I=1,NCOMP
51  IF(X(I) .LE. 0.) GO TO 9
52  B0M=B0M+X(I)*B0(I)
53  GAMA M=GAMA M+X(I)*SQRT(GAMA(I))
54  B1M=B1M+X(I)*B1(I)**0.33333333
55  A1M=A1M+X(I)*A1(I)**0.33333333
56  ALFAM=ALFAM+X(I)*ALFA(I)**0.33333333
57  C1M=C1M+X(I)*C1(I)**0.33333333
58  D1M=D1M+X(I)*D1(I)**0.33333333
59  DO 8 J=1,NCOMP
60  IF (X(J) .LE. 0.) GO TO 8

```

```

61      X2=X(I)*X(J)
62      CK=1.0-K(I,J)
63      A0M=A0M+X2*SQR(T(A0(I)+A0(J))*CK
64      C0M=C0M+X2*SQR(T(C0(I)*C0(J))*CK**3
65      D0M=D0M+X2*SQR(T(D0(I)*D0(J))*CK**4
66      E0M=E0M+X2*SQR(T(E0(I)*E0(J))*CK**5
67      8 CONTINUE
68      9 CONTINUE
69      B1M=B1M*B1M*B1M
70      A1M=A1M*A1M*A1M
71      C1M=C1M*C1M*C1M
72      D1M=D1M*D1M*D1M
73      GAMAM=GAMAM*GAMAM
74      ALFAM=ALFAM*ALFAM*ALFAM
75      10 R0=R*T
76      R1=((-E0M/T+D0M)/(T-C0M)/(T*T)+B0M*R0-A0M
77      R2=D1M/T+A1M
78      R3=B1M*R0-R2
79      R4=ALFAM*R2
80      R5=C1M/(T*T)
81      IF (LG .EQ. 2) GO TO 15
82      COR=.05
83      D=2.5
84      11 R6=EXP(-GAMAM*D*D)*R5
85      PCALC = (((R4*D + GAMAM*R6)*D*D + R6 + R3)*D + R1)*D + R0)*D
86      DIF=PCALC-P
87      IF(ABS(DIF).LT.1E-3 .OR. COR.LE.1E-6) GO TO 14
88      IF(DIF) 13,14,12
89      12 D=D-COR
90      GO TO 11
91      13 COR=0.1*COR
92      D=D+9.0*COR
93      GO TO 11
94      14 IF(NLG .GT. 0) RETURN
95      GO TO 20
96      15 COR = AMIN1(.1*P/R0, .01)
97      D = COR
98      16 R6=EXP(-GAMAM*D*D)*R5
99      PCALC = (((R4*D + GAMAM*R6)*D*D + R6 + R3)*D + R1)*D + R0)*D
100     DIF=P-PCALC
101     IF(ABS(DIF).LT.1E-3 .OR. COR.LE.1E-6) GO TO 19
102     IF(DIF) 18,19,17
103     17 D=D+COR
104     GO TO 16
105     18 COR=0.1*COR
106     D=D-9.0*COR
107     GO TO 16
108     19 IF(NLG .GT. 0) RETURN
109     20 R6 = R6/R5
110     IF(NCOMP .EQ. 1) GO TO 23
111     R7 = (((0.5*GAMAM*D*D + 1.0)*GAMAM*D*D + 1.)*(-R6) + 1.)*2.0*R5/GA
112     -MAM
113     R6=(((1.0-R6)/(GAMAM*D*D)-0.5*R6)*3.0*D*D/(T*T)
114     DO 22 I=1, NCOMP
115     IF (X(I) .LE. 0.) GO TO 22
116     SIGMA=0.0
117     DO 21 J=1, NCOMP
118     IF (X(J) .LE. 0.) GO TO 21
119     CK=1.0-K(I,J)
120     CT=CK/T
121     SIGMA = (((-SQR(T(E0(I)*E0(J))*CT+SQR(T(D0(I)*D0(J))*CT-SQR(T(C0(I)

```

```

122   - *C0(J)))*CT*CT-SQRT(A0(I)*A0(J)))*CK*X(J) + SIGMA
123
124   21 CONTINUE
125     SIGMA=2.0*D*SIGMA
126     F(I) = (((F3(D1M,D1(I))/T+F3(A1M,A1(I)))*ALFAM + F3(ALFAM,ALFA(I)
127     -)*R2)*J*D*D*0.6 + (F3(B1M,B1(I))*R0-F3(A1M,A1(I))-F3(D1M,D1(I))/T)
128     - *1.5)*D + (B0M + B0(I))*R0)*D + F3(C1M,C1(I))*R6-R7*SQRT(GAMA(I)/G
129     -AMAM) + SIGMA)/R0 + ALOG(X(I)*D*R0)
130   22 CONTINUE
131     RETURN
132   23 RTLNF = (( 1.2*R4*D*D*D + 1.5*R3)*D + 2.0*R1)*D + ALOG(D*R0)*R0 +
133     -(((GAMAM*D*D+0.5)*GAMAM*D*D-1.0)*EXP(-GAMAM*D*D)+1.0)*R5/GAMAM
134     F(1) = RTLNF/R0
135     RETURN
136     ENTRY ENT (T, D, DIH, DIS)
137     DIH = (((1.4*D1M/T+1.2*A1M)*ALFAM*D*D*D+R*B1M*T-1.5*A1M-2.0*D1M/T)
138     - *D+((-6.0*E0M/T+5.0*DOM)/T-4.0*C0M)/(T*T)-2.0*A0M+R*B0M*T)*D+((GA
139     -MAM*D*D-0.5)*GAMAM*D*D-3.0)*EXP(-GAMAM*D*D)+3.0)*C1M/(GAMAM*T*T)
140     DIH = .185174*DIH
141     DIS = ((ALFAM*D1M*D*D*D/(5.*T*T)-.5*(R*B1M+D1M/(T*T)))*D-((4.*E0M/
142     -T-3.*DOM)/T+2.*C0M)/(T*T*T)-R*B0M)*D-R*ALOG(R*D*T/14.696)+((-1.0-
143     -5*GAMAM*D*D)*EXP(-GAMAM*D*D)+1.0)*2.0*C1M/(GAMAM*T**3)
144     DIS = .185174*DIS
145     RETURN
146     END

```

ES*RI0JL9(1).CONVER

```

1      SUBROUTINE CONVER (X, NCOMP, TOP, NORD, PCONV)
2      1 FORMAT ('*TEMPERATURA DE OPERACION MENOR QUE LA CRITICA DEL MAS LI
3      -GERO')
4      2 FORMAT ('*TEMPERATURA DE OPERACION MAYOR QUE LA CRITICA DEL MAS PE
5      -SADO')
6      INTEGER ORDEN(20)
7      LOGICAL NORM
8      DIMENSION X(20)
9      COMMON /PROPS/ COMP(2,20),PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20)
10     -,W(20) /ORD/ ORDEN
11     IF (NORD .GE. 2) GO TO 6
12     DO 3 I=1, NCOMP
13     3 ORDEN(I) = I
14     IF (NCOMP .EQ. 1) GO TO 14
15     DO 5 I=2, NCOMP
16     DO 4 J=2, NCOMP
17     NJ = I - J + 2
18     NL = ORDEN(NJ-1)
19     NH = ORDEN(NJ)
20     IF (TC(NH) .GE. TC(NL)) GO TO 5
21     ORDEN(NJ-1) = NH
22     4 ORDEN(NJ) = NL
23     5 CONTINUE
24     NORD = 2
25     6 NL = ORDEN(1)
26     NH = ORDEN(NCOMP)
27     NORM = COMP(1,NL).NE.'METANO'.OR. TC(NH).LE.913.1
28     IF (NORM) GO TO 7
29     PC(NL) = 600.
30     TC(NL) = 495.
31     7 IF (TC(NL) .GT. TOP) GO TO 16
32     IF (TC(NH) .LT. TOP) GO TO 17
33     IF (NCOMP .LT. 4) GO TO (14, 15, 15), NCOMP
34     DO 8 NLT=1, NCOMP
35     I = ORDEN(NLT+1)
36     8 IF (TC(I) .GE. TOP) GO TO 9
37     9 DO 10 IB=19, 20
38     X(IB) = X(NL)
39     W(IB) = W(NL)
40     TC(IB) = TC(NL)
41     PC(IB) = PC(NL)
42     VC(IB) = VC(NL)
43     10 NL = NH
44     NH = NCOMP - NLT - 1
45     DO 12 J=1, 2
46     IF (J.EQ.1 .AND. NLT.EQ.NCOMP-1) GO TO 18
47     IB = 21 - J
48     DO 11 I=J, NH
49     IF (J .EQ. 1) IC = ORDEN(NCOMP-I)
50     IF (J .NE. 1) IC = ORDEN(I)
51     X1 = X(IB)
52     X(IB) = X(IB) + X(IC)
53     W(IB) = (X1*W(IB) + X(IC)*W(IC))/X(IB)
54     TS = (X1*TC(IB) + X(IC)*TC(IC))/X(IB)
55     PS = (X1*PC(IB) + X(IC)*PC(IC))/X(IB)
56     VCD = X1*VC(IB) + X(IC)*VC(IC)
57     TC(IB) = (X1*VC(IB)*TC(IB) + X(IC)*VC(IC)*TC(IC))/VCD
58     VC(IB) = VCD/X(IB)
59     11 PC(IB) = ((12.42*W(IB) - 8.65)*W(IB) + 2.23)*(4.93*W(IB) + 5.808)*
60     -(TC(IB) - TS)*PS/TS + PS

```

```

61 18 IF (NLT .LE. 1) GO TO 13
62 12 NH = NLT
63 13 X(19) = (TOP - TC(20))*VC(20)/((TC(19) - TOP)*VC(19) + (TOP - TC(2
64 -0))*VC(20))
65 X(20) = 1. - X(19)
66 VCM = X(20)*VC(20) + X(19)*VC(19)
67 TCM = (X(19)*VC(19)*TC(19) + X(20)*VC(20)*TC(20))/VCM
68 PS = X(19)*PC(19) + X(20)*PC(20)
69 TS = X(19)*TC(19) + X(20)*TC(20)
70 WS = X(19)*W(19) + X(20)*W(20)
71 PCONV = ((12.42*WS - 8.65)*WS + 2.23)*(4.93*WS + 5.809)*(TCM - TS)
72 -*PS/TS + PS
73 19 IF (NORM) RETURN
74 NL = ORDEN(1)
75 TC(NL) = 343.3
76 PC(NL) = 673.
77 RETURN
78 14 PCONV = PC(1)
79 RETURN
80 15 NLT = 1
81 GO TO 9
82 16 WRITE (6,1)
83 PCONV = PC(NL)
84 GO TO 19
85 17 WRITE (6,2)
86 PCONV = PC(NH)
87 RETURN
88 END

```

MEYCLA DE TRES COMPONENTES

D A T O S

COMPONENTE	FM	TA	TC	PC	VC	ZC	F.AC	KT	PCOR	CS	ΔHF	ΔHV
METANO	16.04	201.10	343.30	673.	1.59	.290	.013	1.	71.0	61.0	-17.89	121.87
PROPANO	44.09	416.00	665.80	517.	3.20	.277	.152	1.	151.0	172.2	-24.82	81.76
HEPTANO	100.20	668.90	972.50	397.	6.02	.259	.352	1.	311.0	394.6	-44.89	87.50

COMPONENTE	AG	BG	CG	DG	AL	BL	CL	DL
METANO	5.597350+00	1.244710-02	2.659700-06	-2.703100-09	1.517540+00	-1.714930-02	1.237940-04	-2.341630-07
PROPANO	-1.008570+00	7.314990-02	-3.768250-05	7.677820-09	4.330270-01	3.916400-04	-2.181850-06	1.020320-08
HEPTANO	-1.229220+01	1.614560-01	-1.720000-05	1.228920-03	4.549530-01	-3.460700-04	2.140200-06	-2.406530-10

MEZCLA DE TRES COMPONENTES

PRESION	600.00 PSIA
TEMPERATURA	-20.00 G. F.
FRACCION MOL DE VAPOR	.5036

C O M P O S I C I O N

COMPONENTE	TOTAL	FRACCION MOL	
		LIQUIDO	VAPOR
METANO	.6163	.2711	.9566
PROPANO	.2222	.4037	.0433
N-HEPTANO	.1615	.3252	.0001

P R O P I E D A D E S

	LIQUIDO	VAPOR
	DENSIDAD	.7086
PESO MOLECULAR	54.74	17.26 LB/LBMOL
VISCOSIDAD	.1292	.0090 CENTIPOISE
DESV ISOT ENTALP	-9342.01	-516.30 BTU/LBMOL
DESV ISOT ENTROP	-20.6337	-8.2020 BTU/(LBMOL GR)
ENTALPIA	-64031.00	-34084.44 BTU/LBMOL
CP	31.5539	8.0717 BTU/(LBMOL GR)

CAPITULO X

P S I C R O.

Cuando un gas se pone en contacto con un líquido en el cual es insoluble, existe una transferencia de masa ya sea hacia la fase gaseosa (evaporación) o hacia la fase líquida (condensación). Este tipo de operaciones se conocen como humidificación o dehumidificación y la materia que se transfiere siempre es la sustancia de la cual se compone la fase líquida.

En este capítulo se tratará con las ecuaciones básicas para medir las propiedades de mezclas vapor - gas y específicamente con el sistema aire - vapor de agua.

ANÁLISIS MATEMÁTICO.

La unidad empleada en las operaciones de humidificación es la humedad absoluta, la cual se define como :

$$Y_M = \frac{Y_a}{Y_b}$$

donde :

Y_a : es la fracción mol del componente que se transfiere.

Y_b : es la fracción mol del gas, y

Y_M : es la humedad absoluta, en moles a / moles b.

Multiplicando el valor de Y_M por el peso molecular del compuesto a y dividiéndolo por el peso molecular del gas, se obtiene Y_m (cuyas unidades son (masa de a) / (masa de b)) la cual es más empleada que

la relación molar.

Si se pone en contacto un gas seco con un líquido en el cual es insoluble, el líquido se evaporará hasta que su presión parcial en la mezcla vapor - gas alcance su presión de vapor a la temperatura a la cual se encuentre la mezcla. La humedad absoluta en este punto de equilibrio se llama humedad absoluta de saturación :

$$Y_{MS} = \frac{P_a}{P_t - P_a}$$

donde :

P_a : es la presión de vapor del compuesto a a la temperatura a la que se encuentra la mezcla.

P_t : es la presión total, y

Y_{MS} : es la humedad absoluta de saturación, en (moles de a) / (moles de b).

Para obtener esta humedad otra vez en unidades masa hay que volver a multiplicar por la relación de pesos moleculares.

Si la presión parcial del compuesto a es menor que su presión de vapor a la temperatura de la mezcla ésta no se encuentra saturada, la temperatura de bulbo seco es la que se obtiene de un termómetro que se ponga en contacto con la mezcla.

La humedad relativa es la relación entre la presión parcial del compuesto "a" en la mezcla vapor - gas y la presión de vapor del compues

to "a" a la temperatura de la mezcla; expresada en porciento se tiene :

$$Y_{MR} = 100 \cdot \frac{P_a}{P_a}$$

donde :

P_a : es la presión parcial del compuesto a, y

Y_{MR} : es la humedad relativa

El porcentaje de saturación o de humedad absoluta se define como $100 \cdot Y_m/Y_{ms}$ en el cual los valores de la humedad absoluta de saturación se calculan a la temperatura de bulbo seco de la mezcla.

El volumen que ocupan una libra de gas y el vapor del compuesto "a" correspondiente a una temperatura y presión dadas es el volumen húmedo y para una mezcla con una humedad absoluta de Y_M está dado por :

$$V_H = \frac{1}{PM_b} + \frac{Y_m}{PM_a} \cdot 359 \cdot \frac{T}{492} \frac{1}{P_t}$$

donde :

PM_b : es el peso molecular del gas

PM_a : es el peso molecular del compuesto a

T : es la temperatura absoluta, en °R

P_t : es la presión total, en atm., y

V_H : es el volumen húmedo, en ft³/lb gas.

Si la mezcla está saturada, el volumen húmedo se obtiene empleando Y_{ms} en vez de Y_m .

Las otras propiedades de una mezcla gas - vapor son su calor húmedo

y su entalpia. Estas deben de tomarse en cuenta ya que en este tipo de operaciones la transferencia de masa va acompañada por una transferencia de calor.

El calor húmedo es el calor necesario para aumentar de un grado la temperatura de una libra de gas y su vapor correspondiente, a presión constante :

$$C_H = C_b + Y_m C_a$$

donde :

C_b : es la capacidad calorífica del gas en BTU/(lb b - °F)

C_a : es la capacidad calorífica del compuesto a, en BTU/(lb a - °F), y

C_H : es el calor húmedo en BTU/(lb b - °F).

La entalpia de la mezcla vapor - gas está dada por la suma de las entalpias del gas y del compuesto "a".

La entalpia del gas está dada por :

$$H_b = C_b (t - t_0)$$

donde :

t_0 : es la temperatura de referencia.

La entalpia del compuesto "a" en fase vapor, si se considera que éste se encuentra a su presión de saturación a la temperatura de referencia, está dada por :

$$H_a = C_a \cdot (t - t_0) + \lambda_0$$

donde :

λ_0 : es el calor latente de vaporización del compuesto "a" a la temperatura de referencia, en BTU/lb mol a.

y la entalpía total está dada entonces por :

$$\begin{aligned} H_T &= C_b \cdot (t - t_0) + Y_m \cdot (C_a (t - t_0) + \lambda_0) \\ &= C_H \cdot (t - t_0) + Y_m \cdot \lambda_0 \end{aligned}$$

La entalpía de una mezcla saturada se obtiene empleando Y_{ms} en vez de Y_m .

Si los valores de Y_{ms} y de Y_m se grafican contra la temperatura, se obtiene una carta psicrométrica. Los valores del calor húmedo y de la entalpía también pueden graficarse en la misma carta.

La temperatura de bulbo húmedo es la temperatura que alcanza una pequeña cantidad de líquido que se evapora en una gran cantidad de gas no saturado, en estado estacionario.

Si se considera una pequeña cantidad de líquido que se encuentre en contacto con una corriente gaseosa rápida y no saturada y si el líquido se encuentra a una temperatura superior a la temperatura de bulbo seco del gas, la presión de vapor del líquido es mayor en su superficie que la presión parcial del vapor en el gas y por lo tanto el líquido se evapora. El calor latente necesario para esta evaporación está dado por el calor sensible del líquido, el cual se enfría. Tan pronto como

la temperatura del líquido es menor que la de bulbo seco del gas, el calor fluye del gas hacia el líquido a una velocidad cada vez mayor a medida que la diferencia de temperaturas aumenta, hasta alcanzar la cantidad necesaria para la evaporación y en ese momento el líquido permanece a una temperatura determinada, más baja que la temperatura de bulbo seco. Esta temperatura es la de bulbo húmedo.

Si se ponen en contacto un gas a una temperatura t_1 y un líquido el cual está a una temperatura t_{s1} y la mezcla vapor-gas resultante está saturada a esa temperatura t_{s1} el gas se habrá humidificado y enfriado por evaporación del líquido. Si el gas es el compuesto b, el líquido el compuesto a y se hace un balance de entalpías, se tiene la ecuación :

$$(C_b + Y_m \cdot C_a) \cdot (t_1 - t_{s1}) = (Y_{ms1} - Y_m) \cdot (C_a (t_{s1} - t_0) + \lambda_0 - Cal \cdot (t_{s1} - t_0))$$

donde :

Cal : es la capacidad calorífica del compuesto a en la fase líquida.

La última cantidad entre paréntesis es igual al calor latente de vaporización a la temperatura t_{s1} , λ_{s1} y por lo tanto se tiene :

$$Y_m = \frac{Y_{ms1} \cdot \lambda_{s1} - C_b (t_1 - t_{s1})}{C_a \cdot (t_1 - t_{s1}) + \lambda_{s1}}$$

donde las unidades son las mismas de Y_{ms1} .

Sustituyendo en esta ecuación varios valores de t_1 para una t_{s1} dada se obtienen los valores correspondientes de Y_m y se puede trazar una curva en la carta psicrométrica, esta curva se llama de saturación adiabática.

SISTEMA AIRE - AGUA.

En el caso del sistema aire - agua, se tienen las ecuaciones :

$$Y_{ms} = 0.62 \cdot \frac{P_{H_2O}}{P_t - P_{H_2O}}$$

$$C_H = 0.2412 + 0.449 \cdot Y_{ms}$$

$$H_T = C_H \cdot (t_s - 32.0) + Y_{ms} \cdot 1075.8$$

$$V_H = 554.8 \cdot (t_s + 459.69) / P_t \cdot (0.0345 + 0.0556 \cdot Y_{ms}) \quad y$$

$$Y_m = \frac{Y_{ms1} \cdot \lambda_{s1} - 6.95 \cdot (t_1 - t_{s1})}{8.04 \cdot (t_1 - t_{s1}) + \lambda_{s1}} \cdot 0.6206896$$

donde :

P_{H_2O} : es la presión de vapor del agua, en mm Hg.

P_t : es la presión total, en mm. Hg.

C_H : es el calor húmedo, en BTU/(lb aire seco - °F).

Y_{ms} : es la humedad absoluta de saturación, en lb agua/
lb aire seco.

H_T : es la entalpia de la mezcla aire - agua en BTU/lb aire seco

t_s : es la temperatura de saturación, en ° F

V_H : es el volumen húmedo, en ft³/lb aire seco

Y_{ms1} : es la humedad absoluta de saturación adiabática, en
lb mol agua/lb mol aire seco

- λ_{s1} : es el calor latente de vaporización a la temperatura de saturación adiabática, en BTU/lb mol agua.
- t_1 : es temperatura de bulbo seco, en °F, y
- t_{s1} : es la temperatura de saturación adiabática, en °F.

Las constantes de las ecuaciones se obtuvieron de la siguiente manera :

en Y_{ms}

$$0.62 = \frac{PM_{H_2O}}{PM_{aire}}$$

en C_H

0.2412 y 0.449 son los valores de las capacidades caloríficas a presión constante para el aire y el agua, en BTU/lb °F.

(Se toman como constantes a cualquier temperatura).

en V_H

0.0345 y 0.0556 son los recíprocos de los pesos moleculares del aire y del agua respectivamente.

$$554.8 = \frac{359}{492} \times 760 \text{ (de la ecuación de } V_H)$$

El término 760 aparece debido a la conversión de P_t en mm. Hg. a atmósferas.

en Y_m

6.95 y 8.04 son las capacidades caloríficas del aire y del agua, expresadas en BTU/lb mol °F.

METODO DE SOLUCION.

En las ecuaciones descritas anteriormente el problema principal radica en determinar de una manera precisa la presión de vapor del agua y su calor latente de vaporización a una temperatura dada. Con este fin se correlacionaron datos experimentales (2) y se obtuvieron dos ecuaciones, una para cada una de las dos propiedades. La correlación fue hecha empleando el programa "AJUSTE" que se describe en la última sección y las ecuaciones que se obtuvieron son : (estas correlaciones se presentan como ejemplo de "AJUSTE").

$$\log P_{H_2O} = \frac{4.9582155 \times 10^{-2} + 2.08046935 \times 10^{-2} \times T}{1.0 + 2.59358867 \times 10^{-3} \times T}$$

$$\begin{aligned} \lambda_{vap} &= 19454.5112 - 5.32746124 \times T \\ &\quad - 3.3553601 \times 10^{-2} \times T^2 + 8.59661959 \times 10^{-5} \times T^3 \\ &\quad - 9.9949659 \times 10^{-8} \times T^4 \end{aligned}$$

donde :

P_{H_2O} : es la presión de vapor del agua en mm. Hg.

λ_{vap} : es el calor latente de vaporización, en BTU/lb-mol, y

T : es la temperatura en °F.

Con estas ecuaciones se puede determinar la presión de vapor del agua con un error de menos del 1 % y el calor latente de vaporización con uno menor al 1.5 %.

DESCRIPCION DEL PROGRAMA.

El programa PSICRO calcula los valores del calor húmedo de saturación, del volumen húmedo de saturación y los diferentes valores de la humedad absoluta para el sistema aire-agua y para temperaturas de saturación que van de los 80 a los 190 grados Fahrenheit a una presión de 585 mm. de mercurio (la de la Ciudad de México).

Asimismo, PSICRO calcula la humedad absoluta para varias parejas de temperaturas de bulbo seco y de bulbo húmedo. Este cálculo se hace dejando fija la temperatura de bulbo seco y variando la temperatura de saturación adiabática hasta alcanzar la de bulbo seco.

Las ecuaciones empleadas en el programa son las descritas anteriormente para el sistema aire-agua.

Las ecuaciones para calcular la presión de vapor y el calor latente de vaporización del agua están declaradas como las funciones FTEMP y FHV que se describieron anteriormente en la subrutina "ECVAP".

Aunque el programa PSICRO está hecho para el sistema aire-agua y para una presión de 585 milímetros de mercurio, se pueden calcular los puntos de la carta psicrométrica para el mismo sistema a otra presión atmosférica cambiando ésta y el límite superior de la temperatura; también se puede emplear para otros sistemas cambiando las ecuaciones : si el gas sigue siendo aire nada más habría que cambiar la

capacidad calorífica del agua por la del nuevo compuesto que se difunde, el calor latente de vaporización de éste a 32° F y las funciones FTEMP y FHV (éstas se pueden deducir con la ayuda de la subrutina "ECVAP"). Si el sistema cambia totalmente, habría que cambiar las ecuaciones en su totalidad.

NOMENCLATURA DEL PROGRAMA

P S I C R O

- CS : Calor húmedo, en BTU/(lb aire seco - °F)
- DT : Diferencia entre la temperatura de saturación adiabática y la temperatura de bulbo seco, en el cálculo de la humedad absoluta.
- F : Fracción de la humedad absoluta.
- FHV : Función para el cálculo del calor latente de vaporización del agua, en BTU/lb mol agua.
- FTEMP : Función para el cálculo de la presión de vapor del agua, en mm Hg.
- HY : Entalpia de la mezcla aire - vapor de agua, en BTU/lb aire seco.
- PT : Presión total, en mm Hg.
- P0 : Presión de vapor del agua, en mm Hg.
- TH : Temperatura de bulbo seco, en °F.
- TH1 : Temperatura de bulbo seco, en °F.
- TS : Temperatura de saturación, en °F.

- VH : Volumen húmedo, en ft^3/lb aire seco.
- YA : Humedad absoluta a unas determinadas temperaturas de bulbo seco y húmedo, en lb agua/ lb aire seco.
- YS : Humedad absoluta de saturación, en lb agua/ lb aire seco.
- YSP : Humedad absoluta, en lb agua/ lb aire seco.
- YS1 : Humedad absoluta de saturación adiabática, en lb mol agua/ lb mol aire seco.

ES*RIUJLQ(1)*PSICRO

```

1 DIMENSION YSP(9), YS1(26), YA(26), TH(26)
2 DATA PT/385.0/
3 PRINT 22
4 WRITE(6,9)
5 TS = 80.0
6
7 1 PU = EXP(2.30258509*FTEMP(TS))
8 YS = 0.6206896*PU/(PT-PU)
9 CS = 0.2412 + 0.449*YS
10 HY = CS*(TS - 32.0) + YS*1075.8
11 VH = 554.8*((TS+459.69)/PT*(0.0345 + 0.0556*YS))
12 F = 0.1
13 DO 2 N=1,9
14 YSP(N) = F*YS
15 2 F = F + 0.1
16 WRITE(6,6) TS, CS, HY, VH, YS, YSP
17 IF(TS.GE.190.0) GO TO 5
18 TS = TS + 10.0
19 GO TO 1
20 5 WRITE(6,10)
21 TS = 80.0
22 3 I = 0
23 TH1 = 80.0
24 4 I = I + 1
25 TH(I) = TH1
26 PU = EXP(2.30258509*FTEMP(TH1))
27 YS1(I) = PU/(PT-PU)
28 DT = TS - TH1
29 YA(I) = (YS1(I)*FHV(TH1) - 6.95*DT)/(8.04*DT + FHV(TH1))
30 - *0.6206896
31 IF(TH1.GE.TS) GO TO 12
32 TH1 = TH1 + 10.0
33 GO TO 4
34 12 J = 1
35 WRITE(6,7) TS, (TH(I), I=1, J)
36 WRITE(6,8) (YA(I), I=1, J)
37 IF (TS.GE.190.0) STOP
38 TS = TS + 10.0
39 GO TO 5
40 6 FORMAT (5X, F6.2,5X,F6.4,5X,F7.2,4X,F7.3,/,5X,10(F9.7,2X),/)
41 7 FORMAT (/5X,F6.2,/, (5X,13(F6.2,3X)))
42 8 FORMAT (5X,13(F6.4,3X),/)
43 9 FORMAT (5X,'TEM.S.',5X,'C.H.S.',5X,'ENT.SAT',4X,'V.H.S.',/,/,9X,'YS'
44 -,7X,'0.1YS',6X,'0.2YS',6X,'0.3YS',6X,'0.4YS',6X,'0.5YS',6X,'0.6YS'
45 -,6X,'0.7YS',6X,'0.8YS',6X,'0.9YS',/)
46 10 FORMAT ('1',5X,'TEMPERATURA DE BULBO SECO',/,/,5X,'TEMPERATURA DE BU
47 -LBO HUMEDO',/,/,5X,'HUMEDAD ABSOLUTA A LAS CORRESPONDIENTES TEMPERAT
48 -URAS (SECA Y HUMEDA)',/)
49 20 FORMAT (15,15A5)
50 22 FORMAT ('1',/,/,51X,'CARTA PSICROMETRICA PARA AGUA',/)
END

```

TEMPERATURA DE BULBO SECO
 TEMPERATURA DE BULBO HUMEDO
 HUMEDAD ABSOLUTA A LAS CORRESPONDIENTES TEMPERATURAS (SECA Y HUMEDA)

80.00												
80.00												
.0292												
90.00												
90.00	90.00											
.0260	.0409											
100.00												
90.00	90.00	100.00										
.0244	.0324	.0569										
110.00												
90.00	90.00	100.00	110.00									
.0220	.0320	.0544	.0708									
120.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00								
.0197	.0336	.0518	.0702	.1091								
130.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00	130.00							
.0174	.0312	.0493	.0736	.1063	.1514							
140.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00	130.00	140.00						
.0151	.0268	.0469	.0709	.1035	.1464	.2121						
150.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00	130.00	140.00	150.00					
.0120	.0204	.0444	.0664	.1008	.1455	.2088	.3023					
160.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00	130.00	140.00	150.00	160.00				
.0105	.0241	.0420	.0656	.0980	.1425	.2056	.2966	.4444				
170.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00	130.00	140.00	150.00	160.00	170.00			
.0085	.0210	.0395	.0633	.0953	.1397	.2023	.2949	.4401	.6916			
180.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00	130.00	140.00	150.00	160.00	170.00	180.00		
.0060	.0195	.0371	.0607	.0927	.1367	.1991	.2913	.4358	.6861	1.2056		
190.00												
90.00	90.00	100.00	110.00	120.00	130.00	140.00	150.00	160.00	170.00	180.00	190.00	
.0051	.0172	.0348	.0562	.0900	.1338	.1960	.2877	.4315	.6806	1.1678	2.0366	

CARTA PSICROMETRICA PARA AGUA

T.M.S.	C.H.S.		ENT.SAT		V.H.S.					
	YS	0.1YS	0.2YS	0.3YS	0.4YS	0.5YS	0.6YS	0.7YS	0.8YS	0.9YS
80.00 .0291819	.2543 .0029182	43.60 .0058364	18.489 .0087546							
90.00 .0400978	.2596 .0040898	59.05 .0081796	19.171 .0122693							
100.00 .0569109	.2668 .0056911	79.36 .0113822	19.992 .0170733							
110.00 .0780437	.2766 .0078844	106.39 .0157687	21.008 .0236531							
120.00 .1091045	.2902 .0109105	142.91 .0218209	22.302 .0327314							
130.00 .1514471	.3092 .0151447	195.23 .0302694	24.003 .0454341							
140.00 .2120990	.3364 .0212099	264.51 .0424198	26.328 .0636297							
150.00 .3020020	.3769 .0302262	369.65 .0604524	29.666 .0906786							
160.00 .4144251	.4407 .0444425	534.55 .0688850	34.798 .1333275							
170.00 .6915579	.5517 .0691558	820.11 .1383116	43.565 .2074674							
180.00 .12050291	.7825 .1205029	1412.83 .2411258	61.597 .3016887							
190.00 .28300000	1.5148 .2830001	3290.96 .5673201	118.433 .8509802							
				1.1346402	1.4183003	1.7019603	1.9856204	2.2692804	2.5529405	

SECCION II

CAPITULO XI

re del número de Reynolds. El factor de fricción también interviene en el cálculo de la longitud equivalente de algunos accesorios tales como expansiones y contracciones. Una manera de calcular las longitudes equivalentes es por medio de la ecuación presentada en la página A-26 del CRANE. Esta ecuación es válida para expansiones con cualquier relación de diámetros; sin embargo, para contracciones es válida sólo cuando la relación de diámetros d_1/d_2 es mayor de 0.75; donde d_1 representa el diámetro menor de la contracción y d_2 el mayor.

Las ecuaciones de cálculo para la caída de presión, el factor de fricción y la longitud equivalente de expansiones y contracciones son las siguientes :

Para calcular la caída de presión en el caso de que se manejen líquidos, se empleó la ecuación general de Darcy :

$$\Delta P = 43.5 \times \frac{f L \rho q^2}{d^5} \quad 1)$$

donde :

- ΔP : Caída de presión.
- f : Factor de fricción de Darcy (Adimensional).
- L : Longitud equivalente de la tubería (ft).
- q : Gasto volumétrico (ft³/seg.)
- d : Diámetro interno de la tubería (pulgadas).

En el caso de gases se empleó una forma integrada del balance de Bernoulli.

Cuando la energía potencial y el trabajo se hacen cero como en orificios o tuberías horizontales, el balance de Bernoulli, en forma diferencial es :

$$V dP + \frac{v dv}{g_c} + dF = 0 \quad 2)$$

donde :

V : Es el volumen, en ft^3/lb .

P : Es la presión, en lb/ft^2 .

v : Es la velocidad, en ft/seg .

$$g_c = 32.2 \frac{\text{lb}}{\text{lb}} \cdot \frac{\text{ft}}{\text{seg}^2}$$

dF : Es la variación de energía debida a la fricción, en $\frac{\text{ft} \cdot \text{lb}}{\text{lb}}$ y está dada por :

$$dF = \frac{f}{2 g_c D} \cdot v^2 \cdot dL \quad 3)$$

donde :

f : Es el factor de fricción de Darcy.

D : Es el diámetro de la tubería, en ft ., y

dL : Es un incremento de longitud.

Sustituyendo la expresión de dF en la ecuación 2), se tiene :

$$V dP + \frac{v dv}{g_c} + \frac{f}{2 g_c D} \cdot v^2 \cdot dL = 0 \quad 4)$$

Sustituyendo v por $G \cdot V$ y dv por $G dV$, dividiendo todo por el volumen y despejando -dP se llega a :

$$-dP = \frac{G^2}{gc} \cdot \left(\frac{V \cdot f}{2 \cdot D} \cdot dL + dV \right) \quad 5)$$

Como $V = \frac{1}{\rho}$ y $dV = -\frac{d\rho}{\rho^2}$, se tiene :

$$-\rho dP = \frac{G^2}{gc} \cdot \left(\frac{f}{2 \cdot D} \cdot dL - \frac{d\rho}{\rho} \right) \quad 6)$$

Integrando y despejando G^2 , se llega a :

$$G^2 = \frac{2 gc \cdot \int_{P_2}^{P_1} \rho dP}{\frac{fL}{D} + 2 \cdot \ln \frac{\rho_1}{\rho_2}} \quad 7)$$

Suponiendo un proceso politrópico se tiene :

$$PV^n = Cte \quad 8)$$

Entonces la integral en la ecuación 7) está dada por :

$$\int_{P_2}^{P_1} \rho dP = \frac{1}{C^{1/n}} \cdot \int_{P_2}^{P_1} P^{1/n} dP = \frac{1}{C^{1/n}} \cdot \frac{n}{n+1} \cdot \left[P^{\frac{n+1}{n}} \right]_{P_2}^{P_1} \quad 9)$$

Reemplazando $C^{1/n}$ por $VP^{1/n}$ y sustituyendo por los límites, se llega a :

$$\begin{aligned} \int_{P_2}^{P_1} \rho dP &= \frac{n}{n+1} \cdot \left[\rho_1 P_1 - \rho_2 P_2 \right] \\ &= \frac{n}{n+1} \cdot \rho_1 P_1 \cdot \left[1 - \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right] \\ &= \rho_1 P_1 \cdot \left(\frac{P_1^{\frac{n+1}{n}} - P_2^{\frac{n+1}{n}}}{P_1^{\frac{n+1}{n}}} \right) \cdot \frac{n}{n+1} \end{aligned}$$

$$= \frac{\rho_1 \cdot \left[P_1^{\frac{n+1}{n}} - P_2^{\frac{n+1}{n}} \right]}{P^{1/n}} \cdot \frac{n}{n+1} \quad 10)$$

Como :

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{V_2}{V_1} = \left(\frac{P_1}{P_2} \right)^{1/n}$$

$$\ln \frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{1}{n} \cdot \ln \frac{P_1}{P_2} \quad 11)$$

Combinando las ecuaciones 7), 10) y 11) se llega finalmente a :

$$W^2 = 1.7862 \cdot 10^6 \cdot \frac{D^4 \cdot \rho_1 \cdot n \cdot \left[P_1^{\frac{(n+1)}{n}} - P_2^{\frac{(n+1)}{n}} \right]}{(n+1) \cdot P_1^{1/n} \cdot \left[\frac{1}{n} \cdot \ln \frac{P_1}{P_2} + 6 \cdot f \cdot \frac{L}{D} \right]} \quad 12)$$

ya en unidades consistentes y donde W es el gasto en lb/hr.

D : Es el diámetro, en in.

ρ : Es la densidad, en lb/ft³.

P₁ y P₂ : Son presión, en PSIA, y

L : Es la longitud, en ft.

En el caso de considerarse el proceso como isotérmico, el coeficiente politrópico n adquiere un valor de uno y en el caso de considerarse adiabático debe asignarse a n el valor de Cp/Cv (o k).

Para el factor de fricción se empleó la ecuación de Colebrook :

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log \left[\frac{\epsilon}{3.7 \times D} + \frac{2.51}{\text{Re} \times \sqrt{f}} \right]$$

donde :

Re : Es el número de Reynolds.

f : Es el factor de fricción.

D : Es el diámetro interno de la tubería en ft.

ϵ : Es la rugosidad absoluta en ft.

Para el caso de tubo liso se empleó la siguiente relación :

$$f = \left[2 \cdot \log \left(\frac{Re}{4.5223 \cdot \log Re - 3.8215} \right) \right]^{-2}$$

Para las expansiones y contracciones se tiene :

$$K = \left[1 - \frac{d_1^2}{d_2^2} \right]^2$$

donde :

K : Es el coeficiente de resistencia al flujo.

d_1 : Es el diámetro inferior.

d_2 : Es el diámetro mayor.

METODO DE SOLUCION.

La ecuación 12) y la ecuación de Colebrook para el factor de fricción no se pueden resolver de una manera directa, por lo tanto se verán ahora los procesos iterativos necesarios para su solución.

En la ecuación 12) se emplea el siguiente algoritmo para llevar a cabo el cálculo :

1.- Se supone una caída de presión en el tramo, ΔP .

2. - Se calcula la presión al final del tramo : $P_2 = P_1 - \Delta P$.
3. - Se calcula W_C empleando la ecuación 12).
4. - Si W/W_C es igual a 1.0, la caída de presión supuesta es buena y se procede con el tramo siguiente comenzando por el paso 1.
5. - Si W/W_C es diferente de 1.0, se calcula una nueva ΔP de la manera siguiente :

$$\Delta P = (W/W_C)^2 \cdot \Delta P_{\text{anterior}}$$

y se vuelve al paso 2.

Debido a que $\frac{\rho_1}{P_1^{1/n}}$ es igual a $\frac{\rho_2}{P_2^{1/n}}$ es posible sustituir las condiciones finales en lugar de las iniciales. Puede comprobarse que el algoritmo calcula las condiciones iniciales a partir de las finales con sólo dar el negativo de la longitud sustituyendo, en efecto, P_1 por P_2 y P_2 por P_1 en la ecuación 12), lo cual no altera la expresión.

La ecuación de Colebrook

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log \left(\frac{\epsilon}{3.6 D} + \frac{2.51}{Re \sqrt{f}} \right)$$

es una función implícita de f , y por lo tanto requiere un método iterativo para su solución.

Del diagrama de Moody se aprecia que la función no presenta máximo, mínimo ni punto de inflexión, por lo que es seguro emplear el método de Newton-Raphson para su solución. Este método puede consultarse más adelante en el capítulo de métodos numéricos. Básicamente pue

de describirse como una aproximación sucesiva, de la raíz de una función $Y(X) = 0$ según :

$$X_{K+1} = X_K - \frac{Y(X_K)}{Y'(X_K)}$$

donde X_K es la K -ésima aproximación; $Y'(X_K)$ es la derivada de la función evaluada en X_K .

Estas aproximaciones sucesivas se continúan hasta que se cumpla algún criterio de convergencia especificado o conveniente.

Para la aplicación del método se define la función :

$$Y(f) = \frac{1}{\sqrt{f}} + 2 \log \left(\frac{\epsilon}{3.7 D} + \frac{2.51}{\text{Re} \sqrt{f}} \right)$$

la cual hay que resolver para :

$$Y(f) = 0$$

esto es, cuando es equivalente a la ecuación de Colebrook.

Si se definen :

$$X = \frac{1}{\sqrt{f}}$$

$$A = \epsilon / (3.7 D)$$

$$B = 2.51 / \text{Re}$$

tenemos una expresión más simple y fácil de manejar :

$$Y(X) = X + 2 \log (A + BX) = 0$$

la derivada se expresa como :

$$Y'(X) = 1 + \frac{2B \log e}{A + BX}$$

El método requiere, además, un punto de arranque. Como punto de arranque se proporciona el factor de fricción para el caso de flujo totalmente turbulento. Este se obtiene a partir de la ecuación de Colebrook cuando $Re \rightarrow \infty$:

$$\frac{1}{\sqrt{f_{Re \rightarrow \infty}}} = -2 \log \frac{\epsilon}{3.7 D}$$

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{f_{Re \rightarrow \infty}}}$$

NOMENCLATURA :

- D : Diámetro, in.
- f : Factor de fricción de Darcy.
- Re : Número de Reynolds.
- ϵ : Rugosidad absoluta, ft.
- e : Base de los logaritmos naturales.

DESCRIPCION DEL PROGRAMA.

El programa que se presente en este capítulo puede llevar a cabo el cálculo de la caída de presión en una tubería que maneje gas o líquido.

La tubería puede dividirse a priori en el número de tramos que se desea; es decir, si la tubería cambia de dirección en algún punto, puede desearse el cálculo de la caída de presión en cada una de las secciones de la tubería antes de que ésta cambie de dirección. (Este podría ser el caso de un isométrico).

El programa calcula primero la longitud equivalente para la sección de tubería que se quiera, tomando en cuenta los diferentes accesorios que tenga esta sección.

Inmediatamente después, el programa calculará el número de Reynolds y llamará a la función para el cálculo del factor de fricción, el cual es necesario para calcular la longitud equivalente de expansiones y contracciones y la caída de presión.

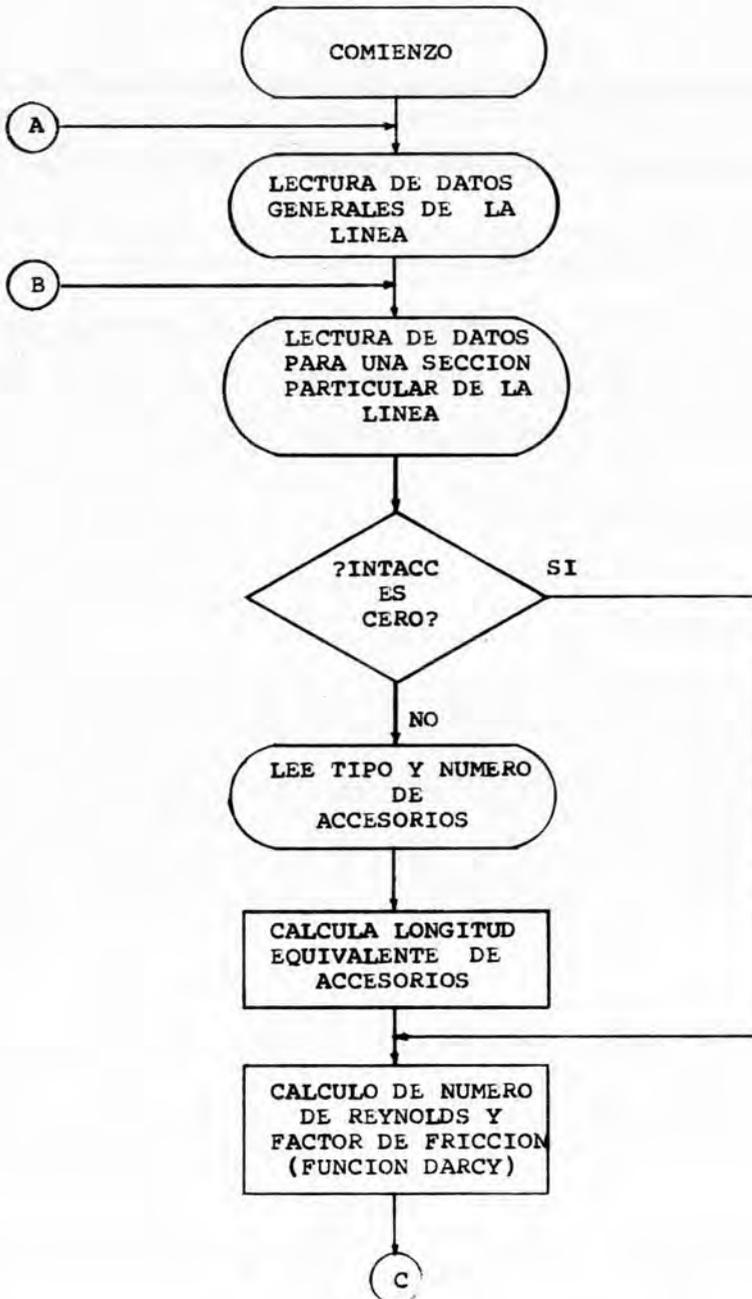
El programa llamará después a la subrutina de gas o de líquido las cuales calcularán la caída de presión en la sección de tubería que se esté considerando.

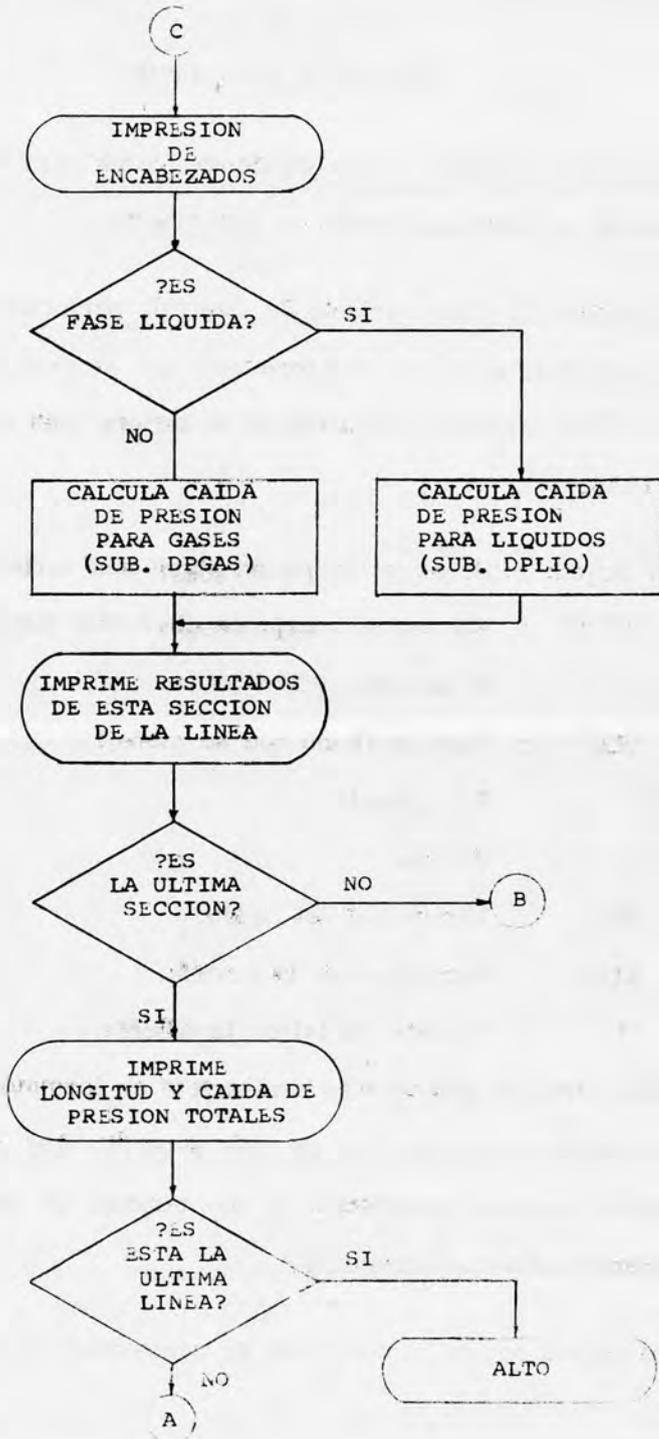
En el caso de gases, el cálculo se llevará a cabo por medio del algo

ritmo descrito anteriormente. Si la tolerancia que tiene la subrutina en la resolución del algoritmo es muy pequeña, el programa aumentará dos veces esta tolerancia (cada vez será diez veces más grande). Si aún así, el algoritmo no converge para la sección de tuberfa, el programa escribirá un mensaje y se detendrá, a menos que haya otro juego de datos.

Cuando el programa acabe de calcular todas las diferentes secciones de la tuberfa, calculará la caída de presión total para la tuberfa en su total, así como su longitud equivalente total.

Si se quiere llevar a cabo el cálculo para diferentes tuberfas, el programa lo puede hacer mediante una variable de control.

PROGRAMA DE CALCULO DE
CAIDA DE PRESION
DIAGRAMA DE BLOQUES



ENTRADA DE DATOS.

El programa requiere de los siguientes datos para poder realizar el cálculo de la caída de presión en una tubería.

- Una tarjeta con una variable de control, perforada con un formato I2 y un título o nombre del problema que se esté tratando, perforado en las columnas restantes de la tarjeta, con una especificación de 13A6.

- Una tarjeta donde se perforen las siguientes variables :

NTDIF : Número de secciones diferentes que se consideren en la tubería.

NLG : Tipo de fluido que se maneje :

1. - Líquido.

2. - Gas.

MU : Viscosidad del fluido.

RUG : Rugosidad de la tubería.

PI : Presión inicial en la tubería.

Estos datos se perforan en una tarjeta en formato libre, separados por comas; si se requiere de más espacio en el caso de que no cupieran los datos anteriores en una tarjeta, se pueden emplear las tarjetas que sean necesarias.

- Una tarjeta con el número total de accesorios en la sección de tube

rfa que se esté considerando, perforado en las dos primeras columnas de la tarjeta con una especificación I2, el tipo de tuberfa (o de sección que se esté considerando), vertical u horizontal, perforado en la columna 4, con una especificación de campo de I2 :

1 : vertical.

2 : horizontal

Un título correspondiente al tramo de la tuberfa que se esté considerando, perforado en las columnas restantes de la tarjeta, con una especificación de campo de 19A4.

- En el caso de que se maneje líquido y la sección de tuberfa que se considere sea vertical, se debe perforar una tarjeta con las elevaciones inicial y final; estos datos se perforan en formato libre, separados por comas.

- A continuación se debe perforar una tarjeta con los datos siguientes:

N : Exponente politrópico (en caso de líquidos se da un valor de cero).

LTR : Longitud de tramos rectos en la sección de tuberfa.

DIAMIN : Diámetro interno de la tuberfa.

W : Gasto de fluido en la tuberfa.

Estos datos deben perforarse en formato libre, separados por comas.

- Después debe perforarse una tarjeta con las parejas siguientes :

ILACC (I) : Subíndice correspondiente a un accesorio en la lis

ta del DATA.

NACC (I) : Número de accesorios de esta especie que se encuentran en la sección de tubería considerada.

NOTA : La lista de subíndices correspondientes a la lista del DATA se da en una tabla más adelante.

Se deben perforar tantas tarjetas como especies diferentes de accesorios aparezcan en la sección de tubería considerada.

Estas parejas de datos deben perforarse en formato libre, separados por comas.

- Para los accesorios de tubería que requieran de más datos que los antes especificados, deben de perforarse las siguientes tarjetas (en el caso de que el accesorio en cuestión no aparezca en la sección de tubería considerada, la tarjeta correspondiente no se perfora), en el orden indicado :
 - 1.- Si hay "T" con flujo en línea debe de perforarse una tarjeta con el diámetro de la "T"; si hay más de una "T", los diámetros de las otras se perforan a continuación, en formato libre, en la misma tarjeta.
 - 2.- Si hay una o más "T" con flujo por la rama, debe de hacerse lo mismo que con las "T" con flujo en línea.

3. - Si hay expansiones en la sección de tubería deben de perforarse el diámetro menor y el diámetro mayor de cada una de ellas, en formato libre, en una nueva tarjeta.
4. - Si hay contracciones en la sección de la tubería debe de hacerse lo mismo que en el caso de las expansiones.

Si se desea el cálculo para una nueva tubería, la variable de control perforada en la primera tarjeta debe ser igual a 1; en el caso contrario será igual a 0. En el caso de que se quiera el cálculo para una nueva tubería se deberán perforar los nuevos datos comenzando por la primera tarjeta. Estos nuevos datos se colocarán inmediatamente después de los ya perforados.

De esta manera puede llevarse a cabo el cálculo de la caída de presión para el número de tuberías que se desee, de una manera muy rápida.

NOTA : En el caso de una tubería inclinada que maneje líquido, el cálculo se puede hacer como si fuera una tubería vertical, dando las elevaciones inicial y final.

RESULTADOS.

El programa escribirá los siguientes resultados :

- El título del problema; el nombre que se le haya dado a la tubería que se calculó.
 - El título dado a la primera sección de tubería que se haya considerado así como el tipo de flujo en esta sección (vertical u horizontal).
 - Después el programa escribirá :
 - El número de la sección de tubería que se haya calculado.
 - El gasto en la sección de tubería, en libras por hora.
 - El gasto en la sección de tubería en piés cúbicos por segundo (en el caso de líquidos solamente).
 - La longitud equivalente total en esa sección de tubería, en piés.
 - El diámetro interno en la sección de tubería, en pulgadas.
 - La densidad del fluido, en libras por pié cúbico.
 - El exponente politrópico (en el caso de gases).
 - El factor de fricción (en el caso de gases).
 - La caída de presión total en la sección de tubería, en PSI.
 - La diferencia de elevación entre el punto inicial y el punto final de la sección de tubería (en el caso de líquidos).
 - La presión inicial en la sección de tubería (en el caso de gases).
- Finalmente escribirá la presión al final de la sección de tubería.

En el caso de gases, si no converge el algoritmo empleado en el cálculo, el programa enviará un mensaje y escribirá los datos iniciales en el siguiente orden :

- La presión inicial.
- El factor de fricción.
- La longitud equivalente total.
- El gasto.
- El diámetro de la sección de tubería.
- La densidad del fluido.
- El exponente politrópico.

El programa imprimirá resultados para cada una de las secciones de tubería que se hayan considerado en la tubería total, comenzando cada vez por el segundo punto tratado arriba.

En ambos casos (gas o líquido), el programa escribirá, antes de terminar con la impresión, la longitud equivalente total para toda la tubería (considerando todas las secciones), así como la caída de presión para toda la tubería.

En el caso de que se haga el cálculo para más de una tubería, el programa imprimirá los resultados para cada una de ellas como se acaba de describir.

NOMENCLATURA DEL PROGRAMA

D E L T A P.

- DARCY : Función para el cálculo del factor de fricción.
- DELTAP : Caída de presión total en un segmento de tubería, PSI.
- DELTAT : Caída de presión total en toda la tubería, PSI.
- DIAMIN : Diámetro interno de la tubería, in.
- DIAMTL : Vector de los diámetros de las "T" con flujo en línea, in.
- DIAMTR : Vector de los diámetros de las "T" con flujo en rama, in.
- DMACON : Vector de los diámetros mayores de las constricciones, in.
- DMAEXP : Vector de los diámetros mayores de las expansiones, in.
- DMECON : Vector de los diámetros menores de las contracciones, in.
- DMEEXP : Vector de los diámetros menores de las expansiones, in.
- F : Factor de fricción.
- ILACC : Vector de los subíndices de los accesorios.
- JJ : Número de accesorios de tipo i.
- LD : Vector de las longitudes equivalentes de los accesorios.
- LDTCON : Longitud equivalente de las contracciones en un segmento de tubería, multiplicada por el factor de fricción, in.
- LDTEXP : Longitud equivalente de las expansiones en un segmento

de tuberfa, multiplicada por el factor de fricción, in.

- LE : Longitud equivalente de la suma de las contracciones y expansiones en un segmento de tuberfa, in.
- LEACC : Longitud equivalente de los accesorios en un segmento de tuberfa, in.
- LEQT : Longitud equivalente total de un segmento de tuberfa, ft.
- LEQTT : Longitud equivalente total de toda la tuberfa, ft.
- LTR : Longitud de tramos rectos en un segmento de tuberfa, ft.
- L1 : Longitud equivalente de las "T" con flujo en línea, en un segmento de tuberfa, in.
- L2 : Longitud equivalente de las "T" con flujo en rama, en un segmento de tuberfa, in.
- MU : Viscosidad del fluido, Cp.
- N : Coeficiente politrópico.
- NACC : Vector de los números de accesorios de los diferentes tipos presentes en un segmento de tuberfa.
- NI : Variable de control :
 1 : Se leen datos para una nueva tuberfa.
 2 : Es la última tuberfa que se quiere calcular.
- NLG : Fase :
 1 : Líquido.
 2 : Gas.
- NOMBRE : Nombre del problema.
- NTACC : Número total de accesorios presentes en un tramo.

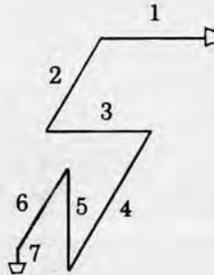
- NTC : Número del segmento de tuberfa.
- NTDIF : Número de segmentos de tuberfa.
- N1 : Posición del segmento de tuberfa :
 1 : Vertical.
 2 : Horizontal.
- P1 : Presión inicial, PSIA.
- P2 : Presión final, PSIA.
- RE : Número de Reynolds.
- RHO : Densidad, lb/ft³
- RUG : Rugosidad de la tuberfa.
- TF : Matriz del nombre de la posición de la tuberfa :
 1 : Vertical.
 2 : Horizontal.
- TITULO : Título de cada segmento de tuberfa.
- W : Gasto, lb/hr.
- Z1 : Elevación inicial de un segmento de tuberfa, en el caso que éste sea vertical, ft.
- Z2 : Elevación final de un segmento de tuberfa, en el caso que éste sea vertical.

EJEMPLO DE CALCULO.

Para ilustrar el empleo de este programa, se efectuó el cálculo de la caída de presión para dos tuberías que manejan gas y una que maneja líquido.

Tuberías que manejan gas :

OPCION 1



La figura anterior muestra un esquema de la tubería, las diferentes secciones están numeradas de 1 a 7.

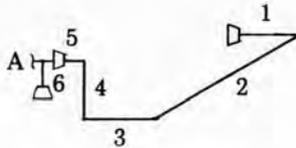
Los datos necesarios son :

Viscosidad	:	0.038 cp.
Rugosidad absoluta	:	0.00015
Presión inicial	:	20.0 PSIA
Densidad	:	0.01806 lb/ft ³
Temperatura	:	1400° F
Coefficiente politrópico	:	1.3

El diámetro interno de toda la tubería es de 20.75 pulgadas y el gas to es de 107 384 lb/hora.

En todas las secciones se consideró un codo de radio largo de 90 grados, excepto en el primero donde además se tomó en cuenta una expansión de 18" a 22" y en el último donde nada más se tomó en cuenta una contracción de 22" a 18".

OPCION 2



En este caso se tienen 6 secciones de tubería.

Los datos en este caso son :

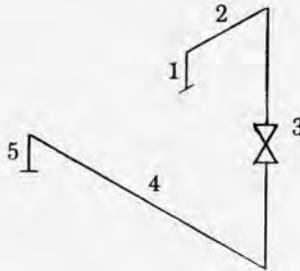
Viscosidad	:	0.038 cp.
Rugosidad absoluta	:	0.00015
Presión inicial	:	20.0 PSIA
Densidad	:	0.01806 lb/ft ³
Temperatura	:	1400° F
Coefficiente politrópico	:	1.3

El diámetro interno de la tubería es de 17 pulgadas y el gasto es de 53692.0 lb/hora, excepto para la sección 6, ya que por A fluyen también 53692.0 lb/hora.

En las secciones 2, 3 y 4 se consideró un codo de radio largo de 90 grados, en la sección 1 se consideró un codo de radio largo de 90 grados y una contracción de 22" a 18", en la quinta se consideró una expansión y una "T" con flujo por la rama; en la sexta se consideró una expansión de 18" a 22".

Tuberías que manejan líquido :

La tubería considerada en este caso se muestra en la figura siguiente:



Los datos necesarios en este caso son :

Viscosidad	:	1.0 cp.
Rugosidad absoluta	:	0.00015
Presión inicial	:	63.8 PSIA
Densidad	:	62.4 lb/ft ³

El diámetro interno en toda la tubería es de 3.068 pulgadas y el gasto es de 50 000 lb/hora.

En todas las secciones se consideró un codo de radio corto de 90 grad^os y en la tercera se consideró además una válvula de compuerta abierta tres cuartos.

El listado del programa y de las subrutinas, así como los resultados obtenidos para estos ejemplos aparecen más adelante.

LISTA DE SUBINDICES DE LA LISTA DEL DATA.

- 1 : Válvula de globo sin obstrucción en el asiento, completamente abierta.
- 2 : Válvula de globo "Y" con carrera a 45 grados de dirección del flujo.
- 3 : Válvula de ángulo sin obstrucción en el asiento, completamente abierta.
- 4 : Válvula de compuerta completamente abierta.
- 5 : Válvula de compuerta bierta tres cuartos.
- 6 : Válvula de compuerta abierta a la mitad.
- 7 : Válvula de compuerta abierta un cuarto.
- 8 : Válvula check convencional completamente abierta.
- 9 : Válvula check de bola en línea, completamente abierta.
- 10 : Válvula de pié con drene, completamente abierta.
- 11 : Válvula de mariposa (de 8" o mayor).
- 12 : Codo de radio corto de 90 grados.
- 13 : Codo de radio corto de 45 grados.
- 14 : Codo de radio largo de 90 grados.
- 15 : Codo recto de 90 grados.
- 16 : "T", flujo en línea.
- 17 : "T", flujo por la rama.
- 18 : Expansión, $\frac{d_1}{d_2} > 0.75$

19 : Contracción, $\frac{d_1}{d_2} > 0.75$

d_1 : Diámetro menor.

d_2 : Diámetro mayor.

ES*RIQJLQ(I),DELTAP

```

1 DIMENSION LD(19),NACC(20),ILACC(20),DIAMTL(20),DIAMTR(20),DMEEXP(2
2 /0),DMAEXP(20),DMECON(20),DMACON(20),TF(2,2),TITULO(19),NOMBRE(13)
3 IMPLICIT REAL (L-M)
4 REAL N
5 DATA LD/340.0,145.0,145.0,13.0,35.0,160.0,900.0,135.0,150.0,420.0,
6 /40.0,30.0,16.0,20.0,50.0,20.0,60.0,1.0,1.0,TF/' VERT','ICAL ',
7 /* HORIZ','ONTAL */
8 30 READ(5,31) N1,NOMBRE
9 READ(5,27) NTDIF,NLG,MU,RUG,P1,RHO
10 2 READ(5,1)NTACC,N1,TITULO
11 IF(N1.EQ.1.AND.NLG.EQ.1) READ(5,27) Z1,Z2
12 READ(5,27) N,LTR,DIAMIN,W
13 IF(NTACC.EQ.0) GO TO 28
14 READ(5,27) (ILACC(I),NACC(I),I=1,NTACC)
15 DO 12 I=1,NTACC
16 JJ = NACC(I)
17 K = ILACC(I)
18 IF(K .GT. 15) GO TO 11
19 LEACC = LEACC + LD(K)*NACC(I)*DIAMIN
20 GO TO 12
21 11 K = K - 15
22 GO TO (3, 5, 4, 9), K
23 3 READ(5,27) (DIAMTL(J),J=1,JJ)
24 DO 6 K1 = 1,JJ
25 6 L1 = L1 + DIAMTL(K1)*LD(16)
26 GO TO 12
27 5 READ(5,27) (DIAMTR(J),J=1,JJ)
28 DO 7 K1 = 1,JJ
29 7 L2 = L2 + DIAMTR(K1)*LD(17)
30 GO TO 12
31 4 READ(5,27) (DMEEXP(J),DMAEXP(J),J=1,JJ)
32 DO 8 K1= 1,JJ
33 8 LDTEXP = LDTEXP + (1.0 -(DMEEXP(K1)/DMAEXP(K1))**2)**2*DMEEXP(K1)
34 GO TO 12
35 9 READ(5,27) (DMECON(J),DMACON(J),J=1,JJ)
36 DO 10 K1=1,JJ
37 10 LDTCON = LDTCON + (1.0 -(DMECON(K1)/DMACON(K1))**2)**2*DMECON(K1)
38 12 CONTINUE
39 28 RE = 6.31596394*W/(DIAMIN*MU)
40 F = DARCY(RUG,DIAMIN,RE)
41 LEQT = LTR
42 IF(NTACC.EQ.0) GO TO 24
43 LE = (LDTEXP + LDTCON)/F
44 LEQT = LEQT + (L1 + L2 + LEACC + LE)/12.0
45 NTC = NTC + 1
46 24 WRITE(6,22) NOMBRE,TITULO,TF(1,N1),TF(2,N1)
47 IF(NLG-1) 20,18,19
48 18 CALL DPLIQ (NTC,P1,F,LEQT,W,DIAMIN,Z1,Z2,RHO,DELTAP,P2)
49 GO TO 20
50 19 CALL DPGAS (N61,NTC,P1,F,LEQT,W,DIAMIN,RHO*N,DELTAP,P2)
51 20 LEQTT = LEQTT + LEQT
52 DELTAT = DELTAT + DELTAP
53 L1 = 0.0
54 L2 = 0.0
55 LEACC = 0.0
56 LDTEXP = 0.0
57 LDTCON = 0.0
58 Z1 = 0.0
59 Z2 = 0.0
60 P1 = P2

```

```
61      IF(NTDIF.GE.1) NTDIF = NTDIF-1
62      IF(NTDIF.GE.1) GO TO 2
63      WRITE(6,25) LEQTT,DELTAT
64      61 IF(N1.EQ.0)STOP
65      LEQTT = 0.0
66      DELTAT = 0.0
67      NTC = 0
68      GO TO 30
69      31 FORMAT (12,13A6)
70      1  FORMAT (2I2,19A4)
71      25 FORMAT (///,42X,'LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL:',8X,1PE15.8,/,42X,'CA
72      /IDA DE PRESION TOTAL:',12X,1PE15.8)
73      22 FORMAT ('1',26X,13A6,/,26X,19A4,/,54X,'TUBERIA:',5X,2A6,///)
74      27 FORMAT ( )
75      END
```

ES*RI00LQ(1),DPGAS

```

1      SUBROUTINE DPGAS (*, NTC, P1, FF, L, w, D, RHO, N, DP, P2)
2      1 FORMAT (///,36X,'RESULTADOS (FLUIDO: GAS)',8X,'SECCION DE TUBERIA N
3      -0.',13,///,36X,'GASTO =',1PE48.7,' LB/HR',///,36X,'LONGITUD EQUIVALE
4      -NTE TOTAL =',0PF27.2,' FT',///,36X,'DIAMETRO INTERNO =',F37.4,' IN'
5      -',///,36X,'DENSIDAD =',F45.6,' LB/FT3',///,36X,'EXPONENTE N =',F42.4,
6      -',///,36X,'FACTOR DE FRICCION =',F35.6,///,36X,'CAIDA DE PRESION =',F3
7      -7.4,' PSI',///,36X,'PRESION INICIAL =',F38.4,' PSIA',///,36X,'PRESIO
8      -N FINAL =',F40.4,' PSIA',//,1)
9      2 FORMAT (///,34X,'FALLA ALGORITMO DPGAS.',///,34X,'DATOS ',///,36X,'
10     -PRESION INICIAL',F40.4,' PSIA',///,36X,'FACTOR DE FRICCION',F37.9,
11     -',///,36X,'LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL',F29.2,' FT',///,36X,'GASTO',1PE5
12     -0.7,' LB/HR',///,36X,'DIAMETRO',0PF47.4,' IN',///,36X,'DENSIDAD',F47
13     -0.6,' LB/FT3',///,36X,'EXPONENTE N',F44.4)
14     REAL L, N
15     A = 5.5985127E-7**w/(D**4*RHO)
16     C = 6.0**FF*L/D
17     UP = 0.1*P1
18     IT = 1
19     TOL = 1E-5
20     IF (N .EQ. 1.0) GO TO 4
21     E = (N + 1.0)/N
22     A = P1**((1./N)*E*A)
23     P22 = P1**E
24     3 P2 = P1 - DP
25     F = (ALOG(P1/P2)/N + C)*A/(P22 - P2**E)
26     IF (ABS(F - 1.) .LT. TOL) GO TO 8
27     UP = F*DP
28     IT = IT + 1
29     IF (IT .LE. 10) GO TO 3
30     GO TO 6
31     4 A = 2.0*P1*A
32     P22 = P1*P1
33     5 P2 = P1 - DP
34     F = (ALOG(P1/P2) + C)*A/(P22 - P2*P2)
35     IF (ABS(F - 1.) .LT. TOL) GO TO 8
36     UP = F*DP
37     IT = IT + 1
38     IF (IT .LE. 10) GO TO 5
39     6 IF (TOL .GT. 1E-5) GO TO 7
40     TOL = 1E-4
41     IT = 1
42     IF (N .NE. 1.) GO TO 3
43     GO TO 5
44     7 WRITE (6,2) P1, FF, L, w, D, RHO, N
45     RETURN 1
46     8 WRITE (6,1) NTC, w, L, D, RHO, N, FF, DP, P1, P2
47     RETURN
48     END

```

ES*RI0JLQ(1).DPLIQ

```

1  SUBROUTINE DPLIQ (NTC,P1,F,L,W,D,Z1,Z2,RHO,DELTAP,P2)
2  IMPLICIT REAL (L)
3  Q = W/(RHO*3600.0)
4  DZ = Z2 - Z1
5  DELTAP = 43.5*F*L*Q*Q*RHO/D**5 + DZ*RHO/144.0
6  P2 = P1 - DELTAP
7  WRITE (6,1) NTC,W,Q,L,D,RHO,DELTAP,DZ
8  WRITE (6,2) P2
9  1 FORMAT(/34X,'RESULTADOS(FLUIDO:LIQUIDO)',10X,'SECCION DE TUBERIA N
10 /0.',I3,///,36X,'GASTO=',T76,1PE16.9,2X,'LB/HR',///,36X,'GASTO=',T76
11 /,1PE16.9,2X,'FT**3/SEG',///,36X,'LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL=',T76,1
12 /PE16.9,2X,'FT',///,36X,'DIAMETRO INTERNO=',T76,1PE16.9,2X,'IN',///,3
13 /6X,'DENSIDAD=',T76,1PE16.9,2X,'LB/FT**3',///,36X,'CAIDA DE PRESION
14 /TOTAL=',T76,1PE16.9,2X,'PSI',///,36X,'DIFERENCIA DE ELEVACION=',T76
15 /,1PE16.9,2X,'FT')
16  2 FORMAT(//34X,'PRESION AL FINAL DE LA SECCION DE TUBERIA=',5X,1PE15
17 /.8,/,,'1')
18  RETURN
19  END

```

ES*RIQJLG(↓).DARCY

```
1      FUNCTION DARCY (EPS,D,RE)
2      IF(RE.LE.2100.0) GO TO 4
3      IF (EPS .EQ. 0.0) GO TO 2
4      A = 3.24324324*EPS/D
5      B = 2.51/RE
6      X = -2.0*ALOG10(A)
7      1 C = B*X + A
8      F = ALOG10(C)*2.0 + X
9      IF(ABS(F).LT.1E-5) GO TO 3
10     X = X - F/(0.868588964*B/C + 1.0)
11     GO TO 1
12     2 X = ALOG10(RE/(ALOG10(RE)*4.5223 - 3.8215))*2.0
13     3 DARCY = 1.0/(X*X)
14     RETURN
15     4 DARCY = 64.0/RE
16     RETURN
17     END
```

CALCULO PARA UNA TUBERIA QUE MANEJA GAS OPCION 1

TRAMO NO. 1

TUBERIA: HORIZONTAL

RESULTADOS (FLUIDO: GAS)	SECCION DE TUBERIA NO. 1
GASTO =	1.0738400+05 LB/HR
LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL =	89.43 FT
DIAMETRO INTERNO =	20.7500 IN
DENSIDAD =	.018060 LB/FT ³
EXPONENTE N =	1.3000
FACTOR DE FRICCION =	.013438
CAIDA DE PRESION =	.7362 PSI
PRESION INICIAL =	20.0000 PSIA
PRESION FINAL =	19.2638 PSIA

CALCULO PARA UNA TUBERIA QUE MANEJA GAS OPCION 1

TAMNO NO. 7

TUBERIA: VERTICAL

RESULTADOS (FLUIDO: GAS)	SECCION DE TUBERIA NO. 7
GASTO =	1.0738400+05 LB/HR
LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL =	53.34 FT
DIAMETRO INTERNO =	20.7500 IN
DENSIDAD =	.018060 LB/FT ³
EXPONENTE N =	1.3000
FACTOR DE FRICCION =	.013438
CAIDA DE PRESION =	.4463 PSI
PRESION INICIAL =	16.0416 PSIA
PRESION FINAL =	15.5953 PSIA

LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL :
CAIDA DE PRESION TOTAL :

5.29601120+02
4.40474331+00

CALCULO PARA UNA TUBERIA QUE MANEJA GAS OPCION 2

TRAMO NO. 1

TUBERIA: HORIZONTAL

RESULTADOS (FLUIDO: GAS)	SECCION DE TUBERIA NO. 1
GASTO =	5.3692000+04 LB/HR
LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL =	64.22 FT
DIAMETRO INTERNO =	17.0000 IN
DENSIDAD =	.018060 LB/FT ³
EXPOLENTE N =	1.3000
FACTOR DE FRICCION =	.014414
CAIDA DE PRESION =	.3674 PSI
PRESION INICIAL =	20.0000 PSIA
PRESION FINAL =	19.6326 PSIA

CALCULO PARA UNA TUBERIA QUE MANEJA GAS OPCION 2

TRAMO NO. 6

TUBERIA: VERTICAL

RESULTADOS (FLUIDO: GAS)	SECCION DE TUBERIA NO. 6
GASTO =	5.3692000+04 LB/HR
LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL =	9.95 FT
DIAMETRO INTERNO =	17.0000 IN
DENSIDAD =	.018060 LB/FT ³
EXPONENTE N =	1.3000
FACTOR DE FRICCION =	.014414
CAIDA DE PRESION =	.0570 PSI
PRESION INICIAL =	17.1604 PSIA
PRESION FINAL =	17.1034 PSIA

LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL:
CAIDA DE PRESTON TOTAL:

5.01955952+02
2.89658850+00

CALCULO PARA UNA TUBERIA QUE MANEJA LIQUIDO

TRAMO NO. 1

TUBERIA: VERTICAL

RESULTADOS (FLUIDO: LIQUIDO)

SECCION DE TUBERIA NO. 1

GASTO=	5.000000000+04	LB/HR
GASTO=	2.225783467-01	FT**3/SEG
LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL=	9.737999916+00	FT
DIAMETRO INTERNO=	3.067999989+00	IN
DENSIDAD=	6.240000010+01	LB/FT**3
CAIDA DE PRESION TOTAL=	9.953981414-01	PSI
DIFERENCIA DE ELEVACION=	2.068031311+00	FT
PRESION AL FINAL DE LA SECCION DE TUBERIA=	6.28046021+01	

CALCULO PARA UNA TUBERIA QUE MANEJA LIQUIDO

TRAMO NO. 5

TUBERIA: VERTICAL

RESULTADOS (FLUIDO: LIQUIDO)

SECCION DE TUBERIA NO. 4

GASTO=	5.000000000+04	LB/HR
GASTO=	2.225783467-01	FT**3/SEG
LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL=	2.952755928+00	FT
DIAMETRO INTERNO=	3.067999989+00	IN
DENSIDAD=	6.240000010+01	LB/FT**3
CAIDA DE PRESION TOTAL=	-1.249537989+00	PSI
DIFERENCIA DE ELEVACION=	-2.952999115+00	FT
PRESION AL FINAL DE LA SECCION DE TUBERIA=	6.71186504+01	

LONGITUD EQUIVALENTE TOTAL:
CAIDA DE PRESION TOTAL:

5.46031923+01
-3.31865028+00

CAPITULO XII

PROGRAMA DOS FASES.

Una gran parte de los cálculos de flujo de fluidos en ingeniería química involucra el flujo en dos fases, líquido y vapor. Actualmente existen más de treinta correlaciones publicadas para el cálculo de la caída de presión en dos fases; sin embargo, normalmente cada correlación reproduce bastante bien los datos empleados para desarrollarla, pero deja de ser útil fuera de esas condiciones.

Dukler (1) probó la validez de cinco de las más usuales, empleando para ello un banco de datos experimentales. Las correlaciones analizadas por Dukler son :

1. - La correlación de Baker (2).
2. - La correlación de Bankoff (3).
3. - La correlación de Chenoweth y Martin (4).
4. - La correlación de Lockhart y Martinelli (5).
5. - La correlación de Yagi (6).

Dukler (1) observó que las correlaciones de Bankoff y de Yagi eran inadecuadas para flujo en dos fases horizontal, para sistemas de dos componentes y que para los mismos sistemas las correlaciones de Lockhart y Martinelli eran buenas.

Por otro lado, la correlación de Baker fue establecida empleando datos de gas natural y aceite crudo en tuberías de diámetros grandes y sir

ve entonces para estos diámetros y viscosidades de líquidos altos.

Dukler observó que la correlación de Lockhart y Martinelli era mejor que todas las otras excepto en dos casos : la correlación de - Chenoweth-Martin era mejor para sistemas aire - agua en tuberías de 2 y 3 1/2 pulgadas (en este caso, estando fijo el diámetro, la correlación se aleja al aumentar la viscosidad del líquido).

Dukler concluyó que la correlación de Lockhart y Martinelli era en general la mejor de todas. Esta conclusión la obtuvo después de hacer un análisis de una gran cantidad de puntos experimentales basándose en los tres parámetros siguientes :

- La media aritmética de los errores, entre los valores obtenidos de una correlación y los correspondientes valores experimentales.
- La desviación standard basada en la media aritmética anterior.
- Y un parámetro que da la desviación fraccional por encima y por debajo de la media.

De entre todos los datos experimentales de que disponía Dukler, este eliminó una gran cantidad que no eran lo suficientemente representativos :

- Eliminó aquellos datos en los que el flujo se había determinado mediante un cálculo de gases ya que era posible tener errores debido a

datos de equilibrio no muy representativos.

- Eliminó los datos obtenidos de tuberías de prueba no horizontales, así como los obtenidos en tramos de tubería muy pequeños ya que los efectos de entrada afectan de manera importante.
- Eliminó datos en los casos en que los accesorios de la línea daban resultados particulares para esa línea.
- Cuando algunas series de datos cubrían el mismo rango experimental, eliminó los que se habían obtenido de una manera menos precisa, así como en el caso en el que se repetía el tamaño de la línea experimental o el gasto.

De la misma manera, Dukler comparó tres técnicas para el cálculo del "holdup". Este puede definirse como la fracción de un elemento de volumen ocupado en cualquier instante por una fase, y es una variable clave en la caracterización del flujo en dos fases. Las correlaciones probadas son: la de Hoogendoorn (7), la de Hughmark (8) y la de Lockhart y Martinelli (5), siendo en general mejor la segunda.

Dukler hace notar que el problema del flujo en dos fases no ha sido atacado desde el punto del análisis dimensional, así como tampoco por análisis de similitud. En el primer caso resultan cuatro grupos adimensionales para cada fase, y en cada uno de ellos la velocidad de la fase es una incógnita, lo cual hace una tarea casi imposible la deter

minación de las constantes necesarias a partir de los datos experimentales disponibles. El segundo caso se describe brevemente a continuación.

ANALISIS DE SIMILARIDAD.

El principio de similaridad establece que si dos sistemas son similares, al encontrar una relación entre las variables de uno de los sistemas, la misma relación existe en el otro sistema.

Dukler estableció entonces las siguientes relaciones :

Si se consideran dos puntos similares A y B en dos sistemas se tiene :

Fuerza Inercial A = Fuerza Inercial B

Fuerza de Presión A = Fuerza de Presión B

Fuerza Viscosa A = Fuerza Viscosa B

Estas relaciones son puntuales y aplican a todos los puntos similares.

Con estas relaciones Dukler demostró que los números de Reynolds y de Euler son iguales en dos sistemas similares. A partir de la similaridad cinética y suponiendo que las cantidades en los dos sistemas en su escala respectiva son independientes de la posición, Dukler relacionó las cantidades puntuales a cantidades promedio.

Por otro lado, haciendo también la suposición que la similaridad cinética aplica a las velocidades individuales de las dos fases, así co

mo aplica a la velocidad de mezcla, Dukler amplió las relaciones al flujo en dos fases y finalmente relacionó las fracciones volumen de gas y líquido puntuales a unas promedio basándose en los requerimientos de la similaridad geométrica.

Los números de Reynolds y de Euler obtenidos por Dukler son entonces :

$$Re_{TP} = l V_M \left[\frac{\rho_L \bar{R}_L (\bar{V}_L / \bar{V}_M)^2 + \rho_G \bar{R}_G (\bar{V}_G / \bar{V}_M)^2 C_1}{\mu_L R_L (\bar{V}_L / \bar{V}_M) + \mu_G \bar{R}_G (\bar{V}_G / \bar{V}_M) C_2} \right] \quad 1)$$

$$Eu_{TP} = 2f = \left[\frac{\partial P / \partial Z}{\bar{V}_M^2 / g c l} \right] \cdot \left[\frac{1}{\rho_L \bar{R}_L (\bar{V}_L / \bar{V}_M)^2 + \rho_G \bar{R}_G (\bar{V}_G / \bar{V}_M)^2 C_1} \right] \quad 2)$$

donde :

- l : Es la escala local de longitud.
- ρ_L : Es la densidad del líquido.
- \bar{V}_L : Es la velocidad promedio del líquido.
- \bar{R}_L : Es la fracción volumen del líquido.
- ρ_G : Es la densidad del gas.
- \bar{V}_G : Es la velocidad promedio del gas.
- \bar{R}_G : Es la fracción volumen del gas.
- μ_L : Es la viscosidad del líquido.
- μ_G : Es la viscosidad del gas.
- \bar{V}_M : Es la velocidad promedio de la mezcla gas-líquido.

$$= \frac{Q_L + Q_G}{A}$$

donde :

Q_L : Es el gasto en volumen del líquido.

Q_G : Es el gasto en volumen del gas.

A : Es el área del flujo.

$$C_1 = \frac{R_G}{\bar{R}_G} \cdot \frac{\bar{R}_L}{R_L} \cdot \frac{\bar{V}_L^2}{\bar{V}_G} \cdot \frac{V_G}{V_L} \cdot \frac{d V_G/d Z}{d V_L/d Z} \quad 3)$$

donde :

R_G : Es la fracción volumen puntual del gas.

R_L : Es la fracción volumen puntual del líquido.

V_G : Es la velocidad local del gas.

V_L : Es la velocidad local del líquido.

Z : Es la dirección del flujo.

$$C_2 = \frac{R_G}{\bar{R}_G} \frac{\bar{R}_L}{R_L} \frac{\bar{V}_L}{\bar{V}_G} \frac{d^2 V_G/d n^2}{d^2 V_L/d n^2} \quad 4)$$

donde :

n : Es la distancia normal a la dirección del fluido.

Si λ es la fracción volumen del líquido de entrada,

se tiene :

$$\frac{\bar{V}_L}{\bar{V}_M} = \frac{\lambda}{\bar{R}_L}$$

$$\frac{\bar{V}_G}{\bar{V}_M} = \frac{1 - \lambda}{\bar{R}_G}$$

$$\text{donde } \lambda = \frac{Q_L}{Q_L + Q_G}$$

$$\text{Re}_{\text{TP}} = 1 \cdot \bar{V}_M \cdot \left[\frac{\rho_L \frac{\lambda^2}{\bar{R}_L} + \rho_G \frac{(1 - \lambda)^2}{\bar{R}_G} \cdot C_1}{\mu_L \lambda + \mu_G (1 - \lambda) \cdot C_2} \right] \quad 5)$$

$$\text{Eu}_{\text{TP}} = 2f = \left[\frac{\partial P / \partial Z}{\frac{\bar{V}_M^2}{g_c l}} \right] \cdot \left[\frac{1}{\rho_L \frac{\lambda^2}{\bar{R}_L} + \rho_G \frac{(1 - \lambda)^2}{\bar{R}_G} \cdot C_2} \right] \quad 6)$$

Basándose en la similaridad dinámica, las propiedades en las dos fases se definen como :

$$\rho_{\text{TP}} = \rho_L \cdot \frac{\lambda^2}{\bar{R}_L} + \rho_G \frac{(1 - \lambda)^2}{\bar{R}_G} \cdot C_1 \quad 7)$$

$$\mu_{\text{TP}} = \mu_L \cdot \lambda + \mu_G \cdot (1 - \lambda) \cdot C_2 \quad 8)$$

El problema que queda entonces por resolver, después de este planteamiento matemático, es el de encontrar la manera de determinar los grupos C_1 y C_2 , los cuales cambiarán según el tipo de flujo que se considere.

METODO DE SOLUCION.

Para poder obtener los términos C_1 y C_2 es necesario hacer varias suposiciones.

Caso 1 : Se tiene un flujo sin deslizamiento entre las dos fases, homogéneo.

En este caso se tiene :

$$C_1 = C_2 = 1.0$$

$$\lambda = R_L$$

$$1 - \lambda = R_G$$

Y se tienen los resultados :

$$Re_{NS} = \frac{4 \cdot W_T}{\pi \cdot D \cdot \mu_{NS}} \quad 9)$$

$$f_{NS} = \frac{\frac{\partial P / \partial Z}{2 \cdot GT^2}}{g_c \cdot \rho_{NS} \cdot D} \quad 10)$$

Las propiedades de mezcla en este caso son :

$$\rho_{NS} = \rho_L \cdot \lambda + \rho_G \cdot (1 - \lambda) \quad 11)$$

$$\mu_{NS} = \mu_L \cdot \lambda + \mu_G \cdot (1 - \lambda) \quad 12)$$

Y finalmente Dukler llegó a las ecuaciones :

$$Re_{TP} = Re_{NS} \cdot \frac{(\rho_L / \rho_{NS}) \cdot \frac{\lambda^2}{R_L} + (\rho_G / \rho_{NS}) \cdot \frac{(1 - \lambda)^2}{R_G} \cdot C_1}{(\mu_L / \mu_{NS}) \cdot \lambda + (\mu_G / \mu_{NS}) \cdot (1 - \lambda) \cdot C_2}$$

$$f_{TP} = f_{NS} \cdot \frac{1}{(\rho_L / \rho_{NS}) \cdot \frac{\lambda^2}{R_L} + (\rho_G / \rho_{NS}) \cdot \frac{(1 - \lambda)^2}{R_G} \cdot C_1}$$

Caso 2 : Hay deslizamiento pero C_1 y C_2 se suponen iguales a 1.

Si se supone que la relación de la velocidad en cada fase a la velocidad promedio es una constante en toda una sección, pero que esta-

constante puede ser diferente de 1, se tiene :

$$Re_{TP} = Re_{NS} \cdot \left[(\rho_L / \rho_{NS}) \cdot \frac{\lambda^2}{\bar{R}_L} + (\rho_G / \rho_{NS}) \cdot \frac{(1 - \lambda)^2}{\bar{R}_G} \right]$$

$$f_{TP} = f_{NS} \cdot \frac{1}{(\rho_L / \rho_{NS}) \cdot \lambda^2 / \bar{R}_L + (\rho_G / \rho_{NS}) \cdot (1 - \lambda)^2 / \bar{R}_G}$$

En este caso, tanto la fracción volumen en el flujo como la fracción volumen local de cada fase, intervienen en la definición de la densidad de la mezcla.

Caso 3 : C_1 y C_2 se suponen iguales a cero (R_G es pequeño).

Se tiene entonces :

$$Re_{TP} = \frac{4 \cdot W_T}{\pi \cdot D \cdot \mu_L} \cdot \frac{1 - X}{\bar{R}_L}$$

$$f_{TP} = \frac{\frac{\partial P / \partial Z}{2 \cdot G_T^2} \cdot \frac{(1 - X)^2}{\bar{R}_L}}{\rho_L \cdot g_c \cdot D}$$

donde X es la fracción peso de vapor.

Caso 4 : $C_1 = C_2 = \bar{V}_L / \bar{V}_G$

Si se supone que las relaciones entre el gradiente de velocidad en fase gaseosa y el gradiente de velocidad en fase líquida son constantes, tanto en la dirección del flujo como en la dirección perpendicular al mismo y que las relaciones de velocidad son las mismas en toda la sección, como se supuso en el caso 2, entonces las relaciones para

C_1 y C_2 se reducen a :

$$C_1 = C_2 = \frac{\bar{V}_L}{\bar{V}_G}$$

En este caso, los resultados que se tienen son :

$$Re_{TP} = \frac{4 \cdot W_T}{\pi \cdot D} \cdot \frac{1}{\mu_L \cdot \bar{R}_L + \mu_G \cdot \bar{R}_G}$$

$$f_{TP} = \frac{\frac{\partial P}{\partial Z}}{\frac{2 \cdot G_T^2}{\rho_{NS} \cdot g_c \cdot D} \cdot \frac{\lambda}{\bar{R}_L}}$$

De esta manera Dukler vió que seleccionando de una forma o de otra los parámetros C_1 y C_2 se llegaba a todas las correlaciones planteadas anteriormente por los diferentes investigadores. Después de esto, - Dukler analizó cual de las suposiciones era la más correcta para obtener la mejor correlación.

Dukler seleccionó las suposiciones del caso 2; la correlación fue obtenida a partir de un gran número de datos experimentales entre los cuales también existía información acerca de la fracción líquida (holdup).

$$Re_{TP} = 4 \cdot W_T / (\pi \cdot D \cdot \mu_{NS}) \cdot \beta$$

donde :

$$\beta = \rho_L / \rho_{NS} \cdot \lambda^2 / \bar{R}_L + \rho_G / \rho_{NS} \cdot (1 - \lambda)^2 / \bar{R}_G$$

ρ_{NS} y μ_{NS} son la densidad y la viscosidad para el caso en el que no

hay deslizamiento.

La ecuación para la caída de presión por fricción es :

$$\frac{\partial P}{\partial Z} = \frac{2 \cdot G_T^2 \cdot f_0}{g_c \cdot D \cdot \rho_{NS}} \cdot \alpha(\lambda) \cdot \beta$$

donde $\alpha(\lambda)$ es la relación de factores de fricción en dos fases y en una fase (f/f_0), como se explica más adelante.

La ecuación para la caída de presión total calculada es :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial Z}\right)_C = \frac{\partial P}{\partial Z} + \frac{1}{g_c \cdot A^2 \cdot \Delta Z} \cdot \left[W_G^2 \Delta \frac{1}{\rho_{GRG}} + \frac{W_L^2}{\rho_L} \Delta \left(\frac{1}{R_L} \right) \right]$$

El empleo de esta correlación requiere de un método para determinar el "holdup" y Dukler escogió el método de Hughmark.

Dukler probó esta correlación con los datos experimentales de que disponía y vio que los resultados obtenidos eran buenos.

Rearreglando la última ecuación se tiene :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial Z}\right)_C = \frac{- \left[\frac{\partial P}{\partial Z} + \alpha \rho_{TP} \frac{g}{g_c} \right]}{1 - \rho_{TP} \cdot G_T \cdot G_G / \rho_{NS} \cdot g_c \cdot P \cdot e_G}$$

donde :

- α : Es el seno del ángulo de inclinación de la tubería.
- ρ_{TP} : Es la densidad de las dos fases.
- G_T : Es la masa velocidad total en lb/(ft² - seg).
- G_G : Es la masa velocidad del gas en lb/(ft² - seg), y
- P : Es presión en lb/ft².

CALCULO DEL HOLDUP.

En general, el holdup es una función de la geometría del sistema y de las propiedades del fluido y por lo tanto, de la temperatura y la presión. De acuerdo con Hughmark (8), R_l está dado por :

$$\frac{W_t}{W_g} = 1 - (e_l / e_g) (1 - K/R_g)$$

donde :

W_t : Gasto total.

W_g : Gasto de gas.

e_l : Densidad de líquido.

e_g : Densidad de gas.

R_l : Holdup de líquido.

R_g : Holdup de gas :

$$R_g = 1 - R_l$$

K es el parámetro de Bankoff, que está dado en función de δ . Este último se calcula en función del número de Reynolds y del número de Froude según :

$$\delta = \frac{Re^{1/6} Fr^{1/8}}{\lambda^{1/4}}$$

en la que :

$$\lambda = \frac{Q_l}{Q_l + Q_g}$$

$$Re = \frac{DG_t}{R_l \mu_l + R_g \mu_g}$$

$$Fr = \frac{V_{ns}^2}{g_c D}$$

$$V_{ns} = (Q_L + Q_G) / A$$

Hughmark presenta una gráfica para evaluar K en función de δ . Puesto que K es función de δ , que a su vez es función de Re , se hace necesaria una solución iterativa, la que se plantea más adelante.

CALCULO DEL FACTOR DE FRICCION.

Para el caso I, la suposición de flujo homogéneo permite tratar a las dos fases como una sola fase equivalente. Para sistemas en dos fases dinámicamente equivalentes, debe aplicarse la misma relación $f - Re$ que en flujo en una fase. La correlación empleada por Dukler para este caso es :

$$f = .0014 + 0.125 / Re^{0.32}$$

donde :

$$Re = DG_t / \mu_{ns}$$

y :

$$\mu_{ns} = \mu_l \lambda + \mu_g (1 - \lambda)$$

Es de notarse que esta correlación es la misma que recomienda Kern (11) para cálculo del factor de Fanning en tubos de cambiadores de calor. De Gance y Atherton (9) plantean la posibilidad de emplear la ecuación de Colebrook.

$$1/\sqrt{f} = -2 \log \left(\frac{\epsilon}{3.7 D} + \frac{2.51}{\text{Re} \sqrt{f}} \right)$$

que incluye la rugosidad de la tubería.

Para el caso II, Duckler construyó la relación gráfica entre f y Re a partir de los datos experimentales, obteniendo varias curvas que mostraban una clara tendencia en función de la fracción volumétrica de líquido. Cuando estas curvas se normalizaron con el factor de fricción en una fase, convergieron esencialmente a una sola, que se puede representar aproximadamente por la relación :

$$\frac{f}{f_0} = 1 - \ln \lambda / (1.281 + 0.478 \ln \lambda + 0.444 \ln^2 \lambda + 0.094 \ln^3 \lambda + 0.00843 \ln^4 \lambda)$$

donde :

- f : Factor de fricción para flujo en dos fases, y
- f_0 : Factor de fricción para flujo en una fase.

METODO DE SOLUCION.

Se considera aquí el cálculo de la caída de presión en flujo isotérmico en dos fases, por el método de Duckler, caso II, con la posibilidad de dividir la tubería en tramos, calculando las propiedades de cada fase en cada uno de ellos.

Para ello se hace el cálculo de la presión de convergencia de la mez

cla (Capítulo IX). Se calculan las constantes de equilibrio y la composición de cada fase (Capítulo V). La densidad de las fases se calcula con la ecuación BWRS (Capítulo II) y sus viscosidades con los métodos del Capítulo III.

Las pérdidas por fricción se evalúan considerando como incremento de longitud cada uno de los tramos en que se divide la línea. La caída de presión se estima multiplicando $\partial P/\partial L$ por el incremento de presión, lo cual no constituye más que la aplicación del método de Euler de resolución de ecuaciones diferenciales (en un capítulo posterior se describe un método más preciso; sin embargo, no se emplea aquí por considerar que el error ya involucrado en la correlación, 20 %, no lo justifica).

El holdup se calcula por el método de Newton-Raphson, explicado más adelante, empleando las correlaciones de Atherton y DeGance (10) para obtener el parámetro de bankoff en función de δ (Subrutina HOLDUP), como sigue :

Sustituyendo el número de Reynolds y el de Froude en la ecuación de δ , se tiene :

$$\delta = \frac{D^{1/6} G^{1/6}}{\mu^{1/6}} \cdot \frac{V_{ns}^{1/4}}{g_c^{1/8} D^{1/8}} \cdot \lambda^{-1/4}$$

Simplificando, y teniendo en cuenta que δ es adimensional, se tiene :

$$\delta = 1.974 G^{1/6} D^{1/24} V_{ns}^{1/2} / (V_{sl}^{1/4} \mu^{1/6})$$

donde :

G : Masa velocidad, en lb/ft² seg.

D : Diámetro, en in.

V_{ns} : Velocidad superficial total, definida como :

$$(Q_l + Q_g) / A$$

en ft/seg.

V_{sl} : Velocidad superficial de líquido, definida como Q_L/A, en ft/seg.

μ : Viscosidad de la mezcla, en Cp, definida como :

$$\mu = R_1 \mu_l + (1 - R_1) \mu_g$$

En el proceso iterativo se expresa δ como :

$$\delta = C_1 / \mu^{1/6}$$

donde :

$$C_1 = 1.974 G^{1/6} D^{1/24} V_{ns}^{1/2} / V_{sl}^{1/4}$$

El parámetro de flujo de Bankoff se calcula por las ecuaciones siguientes :

Para $\delta < 10$

$$K = -0.16367 + 0.31037 \delta - 0.03525 \delta^2 + 0.001366 \delta^3$$

Para $\delta \geq 10$

$$K = 0.75545 + 0.003585 \delta - 1.436 \cdot 10^{-5} \delta^2$$

Para la aplicación del Newton-Raphson se define la función :

$$f(R_1) = (1 - \lambda) K + R_1 - 1$$

cuya derivada es :

$$\frac{\partial f}{\partial R_1} = (1 - \lambda) \frac{\partial K}{\partial \delta} \frac{\partial \delta}{\partial R_1} + 1$$

La parcial de K con respecto a δ es fácil de obtener. La parcial de δ con respecto a R_1 se expresa como :

$$\frac{\partial \delta}{\partial R_1} = -\frac{1}{6} \delta / \mu$$

La primera estimación de R_1 se toma como :

$$R_{11} = (\lambda + 1) / 2$$

Para el cálculo del factor de fricción se emplea la función DARCY, explicada en un capítulo anterior, a la cual hay que proporcionar una rugosidad absoluta de cero, para estar de acuerdo con Dukler. El uso de una rugosidad diferente de cero introduce un margen de seguridad y establece una distinción en los materiales de que puede estar hecha la tubería.

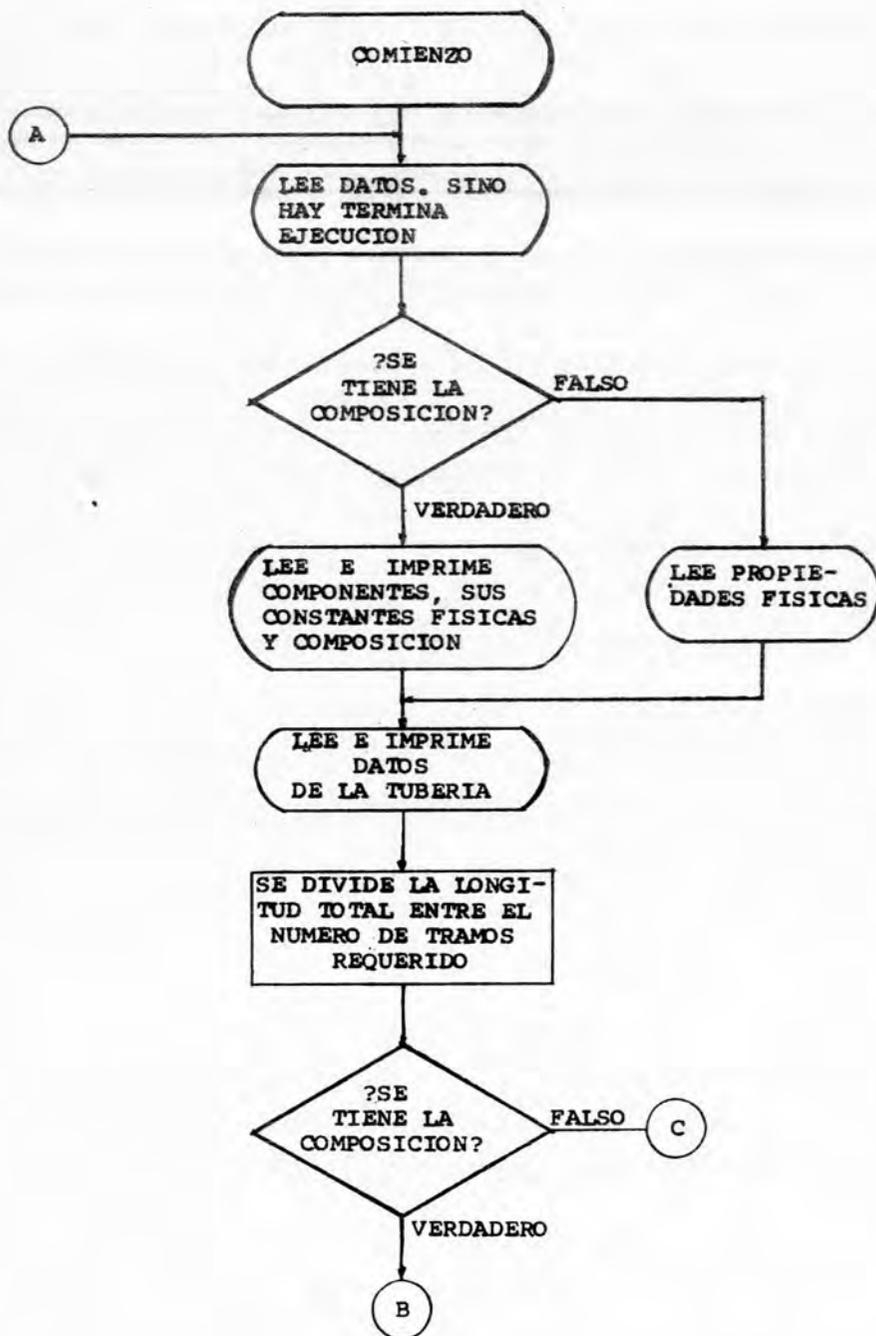
DESCRIPCION DEL PROGRAMA.

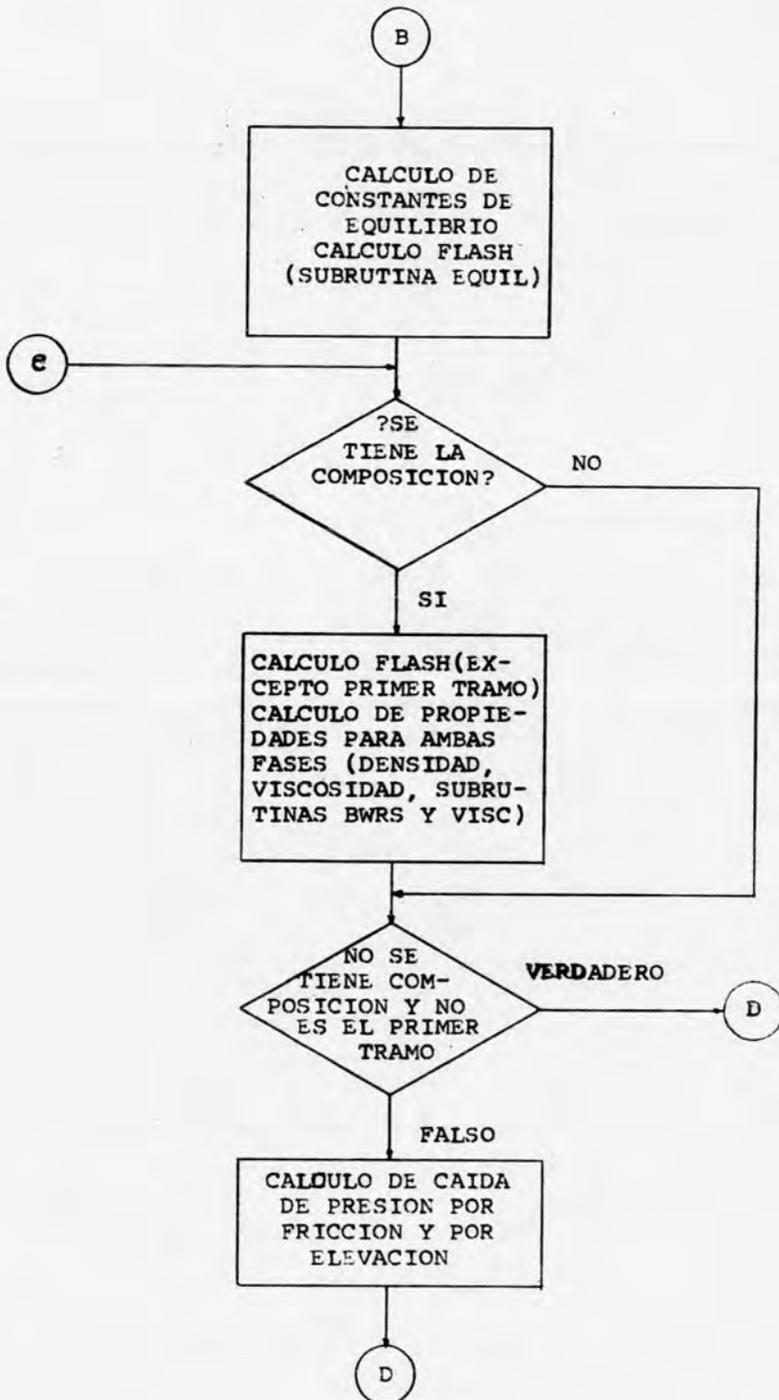
El programa para cálculo de caída de presión en líneas con flujo en dos fases emplea los métodos explicados anteriormente, aplicando, para ello, las subrutinas BWRS, CONVER, EQUIL, HOLDUP y la función DARCY y puede hacer el cálculo con equilibrio líquido-vapor, si se le proporciona la composición. Si esta última no se tiene, el programa lee las propiedades de cada fase y las toma como constantes a lo largo del problema, considerando que en este caso sólo se altera la caída de presión por aceleración de tramo en tramo (de cualquier forma, el cambio en la caída de presión total no es significativo y no tiene mucho sentido dividir en tramos si se dan las propiedades como constantes).

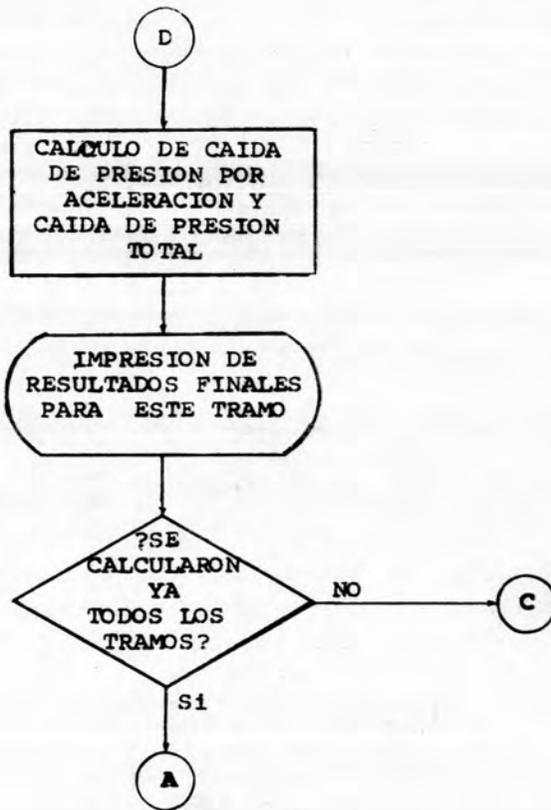
El algoritmo del programa principal puede verse con mayor claridad en el diagrama de bloques.

La subrutina HOLDUP aplica el método de Newton-Raphson al método de Hughmark, como se explicó antes. Se puede presentar el caso (poco frecuente) de que este método oscile sin converger; tomando en cuenta esto, se establece un límite de diez iteraciones (más del doble de las ordinariamente necesarias), después de las cuales se reduce el incremento de Newton-Raphson a la mitad, con lo que es posible lograr la convergencia normal).

El programa imprime los datos leídos y, al final de cada cálculo, las propiedades de cada fase y las de la mezcla, considerando deslizamiento constante, la caída de presión por fricción, por aceleración, la de elevación y la total, así como el holdup calculado, el factor de fricción y el número de Reynolds en dos fases y las velocidades superficiales de las dos fases.

PROGRAMA DE FLUJO EN DOS FASES
METODO DUKLER II





ENTRADA DE DATOS.

Primera tarjeta :

- NCOMP : Número de componentes. Si no se va a proporcionar la com
posición, se da como cero. Especificación I 2.
- NTRAM : Número de tramos en que se desea dividir la línea para
el cálculo. Especificación I 2.
- TITULO : Identificación del problema. Especificación 12 A 6, A 4,
es decir, hasta el fin de la tarjeta.

Segunda tarjeta (sólo si NCOMP no es cero).

Se ajusta al mismo formato que en el Capítulo IX.

- COMP : Identificación del componente. Especificación 2 A 6.
- PM : Peso molecular del componente. Especificación F 7.2.
- TB : Temperatura de ebullición normal, °R. Especificación-
F 6.1.
- TC : Temperatura crítica, en °R. Especificación F 6.1.
- PC : Presión crítica, en PSIA. Especificación F 6.0.
- VC : Volumen crítico, en $\text{ft}^3/\text{lb mol}$. Especificación F 5.2.
- ZC : Factor de compresibilidad crítico. Especificación F 5.3.
- W : Factor acéntrico. Especificación F 5.3.
- SOUDER : Constante de Souders. Especificación 6 X, F 6.1, es de
cir, cols. 59-64.
- KTROL : Constante de control para subrutina VISC. (1 : componenu

te no polar; 2 : componente polar con puentes de hidrógeno, 3 : componente polar, sin puentes de hidrógeno). Especificación F 2.0.

Se leen tantas tarjetas de este tipo como componentes haya.

Segunda tarjeta (si NCOMP es cero) :

RHOL : Densidad del líquido, en lb/ft³. Formato libre.
 RHOG : Densidad del gas, en lb/ft³. Formato libre.
 MUL : Viscosidad del líquido, en Cp. Formato libre.
 MUG : Viscosidad del gas, en Cp. Formato libre.
 V : Fracción peso de vapor (lb vapor/lb totales). Formato libre.

Siguiente tarjeta (si NCOMP no es cero) :

Z : Composición en fracción mol, de todos los componentes, en formato libre.

Siguiente tarjeta :

P : Presión inicial, en PSIA. Formato libre
 TI : Temperatura de operación, en °F (si NCOMP es cero, se puede dar como cero). Formato libre.
 WTH : Gasto total en lb/hr. Formato libre.
 L : Longitud equivalente total, en ft.
 DI : Diámetro interno, en in. Formato libre.
 EPS : Rugosidad absoluta (cero, si se desea ser consistente con Dukler), en ft. Formato libre.
 ANG : Angulo de inclinación, en grados, de la línea. Formato libre.

PROGRAMA DE FLUJO EN DOS FASES

INDICE DE VARIABLES

- ANG : Angulo de inclinación de la tuberfa, en grados.
- CEQ : Constante de equilibrio.
- CK : Parámetro de interacción Starling.
- COMP : Identificación de los componentes
- CTE : Matriz de constantes de la ecuación BWRS (componentes puros).
- CTEM : Vector de constantes de la ecuación BWRS (mezcla).
- DENSL : Vector de densidades de componentes puros en fase líquida.
- DI : Diámetro interno, in.
- DPACS : Término de caída de presión por aceleración, adimensional.
- DPELEV : Término de caída de presión por elevación en PSI/ft.
- DPRIC : Caída de presión por fricción, en PSI/ft.
- DPL : Caída de presión total, PSI.
- DPT : Caída de presión total, PSI/ft.
- EPS : Rugosidad absoluta, ft.
- FTP : Factor de fricción de dos fases.
- GG : Masa velocidad del gas, $\text{lb/ft}^2 \text{ seg.}$
- GL : Masa velocidad del líquido, $\text{lb/ft}^2 \text{ seg.}$
- GT : Masa velocidad total, $\text{lb/ft}^2 \text{ seg.}$

ITRAM	: Número de tramo.
KTROL	: Vector de identificación de polaridad de los componentes, para la subrutina VISC.
L	: Longitud total, ft.
LANDA	: Fracción volumétrica de líquido, considerando solamente flujos.
LTRAM	: Longitud de cada tramo.
MUCS	: Viscosidad de la mezcla en base a LANDA, cp.
MUG	: Viscosidad del gas, cp.
MUL	: Viscosidad del líquido, cp.
NCOMP	: Número de componentes.
NLG	: Variable de control en subrutina DENFUG.
NTRAM	: Número de tramos.
P	: Presión inicial, PSIA.
PC	: Presión crítica, PSIA.
PCONV	: Presión de convergencia, PSIA.
PM	: Peso molecular, lb/lb mol.
PMG	: Peso molecular, fase gaseosa.
PML	: Peso molecular, fase líquida.
PMT	: Peso molecular total.
QG	: Flujo volumétrico de gas, ft ³ /seg.
QL	: Flujo volumétrico de líquido, ft ³ /seg.
RECS	: Número de Reynolds.
RG	: Fracción volumétrica de gas, teniendo en cuenta que las dos fases tienen diferente velocidad.

RHOCS	: Densidad de ambas fases, con deslizamiento constante.
RHOG	: Densidad fase gaseosa, lb/ft ³ .
RHOL	: Densidad fase líquida, lb/ft ³ .
RHONS	: Densidad de ambas fases, sin considerar deslizamiento.
RL	: Fracción volumétrica de líquido, teniendo en cuenta - deslizamiento.
T	: Temperatura, °R.
TC	: Temperatura crítica, °R.
TI	: Temperatura, °F.
TITULO	: Identificación del problema.
V	: Fracción vaporizada (en peso).
VC	: Volumen crítico, ft ³ /lb mol.
VNS	: Suma de velocidades superficiales de líquido y gas.
VSG	: Velocidad superficial del gas, es decir, velocidad del gas calculada como si no hubiera líquido, ft/seg.
VSL	: Velocidad superficial del líquido, ft/seg.
W	: Factor acéntrico.
WG	: Gasto de gas, en lb/seg.
WL	: Gasto de líquido, lb/seg.
WT	: Gasto total, en lb/seg.
WTH	: Gasto total, en lb/hr.
X	: Fracción mol en el líquido.
Y	: Fracción mol en el vapor.
Z	: Fracción mol total.
ZC	: Factor de compresibilidad crítico.

EJEMPLO DE CALCULO.

Supóngase que se desea calcular la caída de presión de una mezcla de hidrocarburos bajo las siguientes condiciones (10) :

D = 24 in	$\mu_l = 0.8335$ cp
T = 55° F	$\mu_g = 0.0115$ cp
P = 561.1 psia	$W_l = 138.53$ lb/seg
$e_l = 51.99$	$W_g = 3.57$ lb/seg
$e_g = 2.007$ lb/ft ³	L = 100 ft.

Los resultados pueden observarse en los listados que se presentan a continuación (véase también la ref. 12 para las correcciones al ej. 10, ref. 10).

Como segundo ejemplo de cálculo, se presenta una mezcla con la siguiente composición :

Hidrógeno	:	3.02 %
Metano	:	.42
Etano	:	4.64
Propano	:	3.13
i - Butano	:	.74
n - Butano	:	.89
n - Pentano	:	83.42

Las condiciones son las siguientes :

$$D = 10.02 \text{ in.}$$

$$L = 100 \text{ ft.}$$

$$P = 129.7 \text{ psia.}$$

$$T = 120^\circ \text{ F.}$$

$$W_t = 10^5 \text{ lb/hr.}$$

Se asigna, esta vez, una elevación de 10° y una rugosidad de 0.00015.

Los resultados también se muestran en los listados a continuación.

ES*KIQUU(1),2FASES

```

1 1 FORMAT ('0',57X,'METODO LUKLER 11',//,61X,'TRAMO',I3,/,38X,'PRESI
2 -ON',F11.2,' PSIA',5X,'FRACCION PESO DE VAPOR',F8.4,/,38X,'TEMPERA
3 -TURA',F7.2,' G.H.',5X,'PRESION DE CONVERGENCIA',F7.0,' PSIA',///,6
4 -0X,'COMPOSICION',//,38X,'COMPONENTE',11X,'FRACCION MOL',9X,'CTE. E
5 -QUILIBRIO',/,55X,'LIQUIDO',8X,'VAPOR',/(37X,2A6,7X,0PF6.4,7X,F6.4
6 -,7X,1PE10.3))
7 2 FORMAT (///,27X,'DENSIDAD',10X,'VISCOSIDAD',10X,' PESO MOLECULAR',
8 -8X,'VELOCIDAD SUPERFICIAL',11X,'GASTO',/,27X,'[LB/FT3]',13X,'[CP]',
9 -,15X,'[LB/LBMOL]',17X,'[FT/SEG]',16X,'[LB/SEG]',/,6X,'LIQUIDO',F2
10 -2.4,F18.4,F22.3,F26.4,F24.2,/,6X,'VAPOR',F24.4,F18.4,F22.3,F26.4,F
11 -24.2,/,6X,'DOS FASES',F20.4,F18.4,F22.3,F26.4,F24.2,///,32X,'DIAMET
12 -RO',F17.2,' IN',7X,'ΔP FRICCION',1PE15.4,' PSI/FT',/,32X,'NO. REYN
13 -OLDS',E13.4,10X,'ΔP ACELERACION',E12.4,/,32X,'LANDA',0PF20.5,10X,'
14 -ΔP ELEVACION',1PE14.4,' PSI/FT',/,32X,'RL',0PF23.5,10X,'ΔP TOTAL',
15 -F18.5,' PSI',/,32X,'FTP',F22.5)
16 3 FORMAT (/,63X,'O A T O S',/,10 COMPONENTE',6X,'KTROL',4X,'F. MOL',
17 -6X,'P. MOL.',5X,'T. EB.',4X,'T. CRIT.',4X,'P. CRIT.',6X,'V. CRIT.',
18 -2X,'Z CRIT.',4X,'F. AC.',4X,'C. SOUDER',/,37X,'[LB/LBMOL]',4X,'[G
19 -. R.]',4X,'[PSIA]',4X,'[FT3/LBMOL]',/,{(/,2X,2A6,F7.0,F12.4,F12.2,F
20 -13.2,F11.2,F12.2,F13.2,F8.3,F11.3,F12.2)})
21 4 FORMAT (///,40X,'DIAMETRO',F11.2,' IN',7X,'PRESION',F12.2,' PSIA',/
22 -/,40X,'RUGOSIDAD',F10.5,' FT',7X,'TEMPERATURA',F8.2,' G. F.',/,40
23 -X,'LONGITUD',F11.2,' FT',7X,'GASTO',F14.2,' LB/HR',/,40X,'INCLINA
24 -CION',F8.2,' GRADOS')
25 5 FORMAT (2A6, F7.2, 3F6.0, 3F5.0, 6X, F6.1, F2.0)
26 6 FORMAT ('1', 25X, 13A6)
27 7 FORMAT (2I2, 12A6, A4)
28 8 FORMAT (2A6, 4F10.0)
29 9 FORMAT ( )
30 IMPLICIT REAL (K - M)
31 DIMENSION TITULO(13),X(20),Y(20),Z(20),FL(20),CEG(20)
32 COMMON /PROPS/ COMP(2,20),PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20)
33 -,W(20),KTROL(20),PCOR(20),SOUDER(20),A(20),B(20),C(20),D(20)
34 COMMON /GBWKS/ NLG,NCOMP,CTE(20,11),CTEM(11)
35 COMMON /PIPE/ L,DI,EPS,P,ANG /FLUID/ WL,WG,T,RHOL,RHOG,MUL,MUG
36 - /CVISC/ DENSL(20)
37 NLG = 3
38 10 READ (5, 7, END=25) NCOMP, NTRAM, TITULO
39 IF (NCOMP) 26, 26, 11
40 DO 12 I=1, NCOMP
41 12 READ (5,5) COMP(1,I),COMP(2,I),PM(I),TB(I),TC(I),PC(I),VC(I),ZC(I)
42 -,W(I),SOUDER(I),KTROL(I)
43 13 READ (5,9) (Z(I),I=1,NCOMP)
44 14 READ (5,9) P, TI, WTH, L, DI, EPS, ANG
45 WRITE (6,6) TITULO
46 T = TI + 459.67
47 LTRAM = L/NTRAM
48 WRITE (6,4) DI, P, EPS, TI, L, WTH, ANG
49 IF (NCOMP .EQ. 0) GO TO 18
50 WRITE (6,3) (COMP(1,I),COMP(2,I),KTROL(I),Z(I),PM(I),TB(I),TC(I),
51 -PC(I),VC(I),ZC(I),W(I),SOUDER(I),I=1,NCOMP)
52 PMT = 0.0
53 NORU = 1
54 CALL CONVER (2, NCOMP, T, NORU, PCONV)
55 CALL EQUIL (2, P, CEG, V, X, Y, NCOMP, T, PCONV)
56 WRITE (6,6) TITULO
57 CALL HWRS
58 DO 17 I=1, NCOMP
59 17 PMT = Z(I)*PM(I) + PMT
60 IF N = 5.4541539E-3*DI*DI

```

```

61      WT = WTH/3600.0
62      GT = W/A
63      DPELEV = 0.0
64      DO 24 ITRAM=1, NTRAM
65      IF (NCOMP .EQ. 0) GO TO 22
66      IF (ITRAM .NE. 1) CALL EQUIL (Z, P, CEG, V, X, Y, NCOMP, T, PCONV)
67      DO 20 I=1, NCOMP
68      DO 19 J=1, 11
69      CTEM(J) = CTE(I,J)
70      CALL DENFUG (X, P, T, DENSL(I), FL, Z, 1)
71      CALL DENFUG (X, P, T, RHOL, FL, 1, 1)
72      CALL DENFUG (Y, P, T, RHOG, FL, 1, 2)
73      WRITE (6,6) ITULO
74      WRITE (6,1) ITRAM,P,V,T,PCONV,(COMP(1,I),COMP(2,I),X(I),Y(I),CEQ(I
75      -),I=1,NCOMP)
76      PML = 0.0
77      PMG = 0.0
78      DO 21 I=1, NCOMP
79      PML = X(I)*PM(I) + PML
80      21 PMG = Y(I)*PM(I) + PMG
81      RHOL = RHOL*PML
82      RHOG = RHOG*PMG
83      CALL VISC (NCOMP, X, T, 1, FL, MUL)
84      CALL VISC (NCOMP, Y, T, 2, FL, MUG)
85      V = V*PMG/PMT
86      22 IF (NCOMP .EQ. 0 .AND. ITRAM .GT. 1) GO TO 23
87      WG = V*WT
88      WL = WT - WG
89      GG = WG/A
90      GL = WL/A
91      QG = WG/RHOG
92      QL = WL/RHOL
93      LANDA = QL/(GL + GG)
94      MUCS = (1.0 - LANDA)*MUG + LANDA*MUL
95      RHONS = (1.0 - LANDA)*RHOG + LANDA*RHOL
96      VNS = (GL + GG)/A
97      VSL = LANDA*VNS
98      VSG = VNS - VSL
99      CALL HOLDUP (RL, GT, VNS, VSL, LANDA)
100     RG = 1.0 - RL
101     RHOCS = RHOL*LANDA*LANDA/RL + RHOG*(1.0 - LANDA)**2/RG
102     RECS = 124.01366*RHOCS*UI*VNS/MUCS
103     FTP = ALUG(LANDA)
104     FTP = DAKCY(EPS, DI, RECS)*(1.0 - FTP/((((0.00843*FTP + 0.094)*FTP
105     - + 0.444)*FTP + 0.4781)*FTP + 1.281))
106     DPFRIIC = FTP*GT*GT*(RHOL*LANDA*LANDA/(RHONS*RL) + RHOG*(1.0 - LAND
107     -A)**2/(RHONS*RG))/(772.176*RHONS*DI)
108     IF (ANG .NE. 0.) DPELEV = SIN(ANG*1.7453293E-2)*(RL*RHOL + RG*RHOG
109     -)/144.0
110     23 DPACS = GG*GG/(4635.056*P*RHOG*RG)
111     DPT = (DPFRIIC + DPELEV)/(1.0 - DPACS)
112     DPL = DPT*LTRAM
113     P = P - DPL
114     24 *RIFL (6,2) RHOL,MUL,PML,VSL,WL,RHOG,MUG,PMG,VSG,WG,RHOCS,MUCS,PMT
115     -,VNS,WT,UI,DPFRIIC,RECS,DPACS,LANDA,DPELEV,RL,DPL,FTP
116     GO TO 10
117     25 STOP
118     26 READ (5,9) RHOL,RHOG,MUL,MUG,V
119     GO TO 14
120     END

```

ES*RIQJLQ(↓).HOLDUP

```

1      C      *** METODO DE HUGHMARK ***
2          SUBROUTINE HGLUUP(RL,GT,VNS,VSL,LANDA)
3          IMPLICIT REAL(K-M)
4          COMMON/PIPE/L,D,EPS,P1/FLUID/WL,WG,T,RHOL,RHOG,MUL,MUG
5          I = 1
6          ALFA = -1.0
7          C1 = GT**0.16666667*D**4.1666667E-2*SQRT(VNS/SQRT(VSL))*1.9741089
8          1 RL = (1.0 + LANDA)*0.5
9          2 DELTA = C1/((MUL-MUG)*RL + MUG)**0.16666667
10         DDELTA = -0.16666667*DELTA/((MUL - MUG)*RL + MUG)
11         IF (DELTA .GE. 10.0) GO TO 3
12         K = ((0.001366*DELTA - 0.03525)*DELTA + 0.31037)*DELTA - 0.16367
13         DK = (0.004098*DELTA - 0.0705)*DELTA + 0.31037
14         GO TO 4
15         3 K = (-1.436E-5*DELTA + 0.003585)*DELTA + 0.75545
16         DK = -2.872E-5*DELTA + 0.003585
17         4 F = (1.0-LANDA)*K + RL - 1.0
18         DF = (1.0 - LANDA)*DK*DDELTA + 1.0
19         DRL = ALFA*F/DF
20         RL = RL + DRL
21         IF (ABS(DRL).LE.1E-4) RETURN
22         I = I + 1
23         IF (I .NE. 11) GO TO 2
24         ALFA = -0.5
25         GO TO 1
26         END

```

PRUEBA DUKLER

DIAMETRO 23.25 IN PRESION 561.10 PSIA
 RUGOSIDAD .00000 FT TEMPERATURA .00 G. F.
 LONGITUD 100.00 FT GASTO 511560.00 LB/HR
 INCLINACION 5.74 GRADOS

	DENSIDAD [LB/FT ³]	VISCOSIDAD [CP]	PESO MOLECULAR [LB/LBMOL]	VELOCIDAD SUPERFICIAL [FT/SEG]	GASTO [LB/SEG]
LIQUIDO	51.9900	.8300	.000	.9038	138.53
VAPOR	2.0070	.0115	.000	.6033	3.57
DOS FASES	27.3947	.5023	.000	1.5071	142.10

DIAMETRO	23.25 IN	ΔP FRICCION	7.6006-05 PSI/FT
NO. REYNOLDS	2.3697+05	ΔP ACELERACION	9.7378-07
LANDA	.59967	ΔP ELEVACION	2.6087-02 PSI/FT
RL	.71142	ΔP TOTAL	2.61633 PSI
FTP	.02193		

MEZCLA SIETE COMPONENTES

DIAMETRO 10.02 IN PRESION 129.70 PSTA
 RUGOSIDAD .00015 FT TEMPERATURA 120.00 G. F.
 LONGITUD 100.00 FT GASTO 100000.00 LB/HR
 INCLINACION 10.00 GRADOS

D A T O S

COMPONENTE	KIROL	F. MOL	P. MOL. [LB/LBMOL]	T. EB. [G. R.]	T. CRIT. [PSIA]	P. CRIT. [FT ³ /LBMOL]	V. CRIT.	Z CRIT.	F. AC.	C. SOUDER
HIDROGENO	3.	.0314	2.02	36.70	59.90	188.00	1.04	.304	.000	5.40
METANO	1.	.0044	16.04	201.10	343.30	673.00	1.59	.290	.013	61.00
ETANO	1.	.0482	30.07	332.30	549.70	798.00	2.37	.285	.105	116.60
PROPANO	1.	.0325	44.09	416.00	665.80	617.00	3.20	.277	.152	172.20
I-BUTANO	1.	.0077	58.12	470.70	734.60	529.00	4.21	.283	.192	227.80
N-BUTANO	1.	.0092	58.12	490.90	765.40	551.00	4.08	.274	.201	227.80
N-PENTANO	1.	.0666	72.15	556.70	845.10	489.00	4.98	.269	.252	283.40

MEZCLA SIETE COMPONENTES

METODO DUKLER II

TRAMO 1

PRESION 129.70 PSIA FRACCION PESO DE VAPOR .0496
 TEMPERATURA 579.67 G.P. PRESION DE CONVERGENCIA 4862. PSIA

COMPOSICION

COMPONENTE	FRACCION MOL		CTE. EQUILIBRIO
	LIGUIDO	VAPOR	
HIDROGENO	.0035	.5655	1.610+02
METANO	.0020	.0498	2.450+01
ETANO	.0410	.1861	4.538+00
PROPANO	.0320	.0428	1.339+00
I-BUTANO	.0076	.0066	3.563-01
N-BUTANO	.0095	.0043	4.591-01
N-PENTANO	.9043	.1449	1.602-01

	DENSIDAD [LB/FT ³]	VISCOSIDAD [CP]	PESO MOLECULAR [LB/LBMOL]	VELOCIDAD SUPERFICIAL [FT/SEG]	GASTO [LB/SEG]
LIQUIDO	36.6575	.1328	68.926	1.3626	27.35
VAPOR	.4347	.0082	20.510	1.7851	.42
DOS FASES	12.7772	.0622	66.524	3.1477	27.78

DIAMETRO	10.02 IN	ΔP FRICCION	4.1604+04 PSI/FT
NO. REYNOLDS	8.0366+05	ΔP ACELERACION	5.1350+06
LANDA	.43290	ΔP ELEVACION	2.4596+02 PSI/FT
SL	.55103	ΔP TOTAL	2.50120 PSI
FTP	.02543		

CAPITULO XIII

C O M P R E S O R

DISEÑO Y SIMULACION DE COMPRESORES CENTRIFUGOS

Así como las bombas para líquidos, los compresores constituyen el equipo para transportar gases. La función principal de un compresor es dar al gas energía de presión a partir de energía de velocidad. Los compresores se pueden clasificar en centrífugos y de desplazamiento positivo. En los centrífugos, la compresión se logra acelerando el gas a medida que fluye en una dirección radial, del exterior hacia el interior del equipo. En este capítulo se tratará con equipos de este tipo únicamente. Un compresor centrífugo se compone por una coraza y un impulsor; el gas entra cerca del ojo del impulsor y de ese punto es propulsado a gran velocidad y presión desde el extremo del impulsor a un difusor en el cual se acaba de convertir la energía de velocidad en energía de presión. La mayoría de las veces, los compresores centrífugos son de varias etapas para poder así alcanzar una presión elevada.

Después de salir del difusor, el gas entra a un diafragma, el cual lo dirige hacia el ojo del siguiente impulsor.

La transferencia de energía hacia el gas en la compresión provoca que éste se caliente y por lo tanto es necesario enfriarlo entre etapa y etapa.

En este capítulo se trata con las ecuaciones involucradas en el cálculo de compresores centrífugos y se analizan los casos de diseño del equipo y de simulación de las condiciones de salida para un equipo y unas condiciones de entrada previamente determinados.

MODELO MATEMATICO.

Las ecuaciones empleadas en este capítulo están basadas en el manual de Elliott para el cálculo de compresores y son las siguientes.

El exponente adiabático k se calcula con :

$$k = \frac{C_p}{C_v} \quad 1)$$

donde :

C_p : Es la capacidad calorífica a presión constante y se calcula mediante las ecuaciones descritas anteriormente en la subrutina "CPENID".

C_v : Es la capacidad calorífica a volumen constante y se obtiene de :

$$C_v = C_p - R \quad 2)$$

donde R es la constante de los gases ideales ($=1.98719$ cal/°K-g mol).

El factor de compresibilidad se calcula empleando la ecuación de Redlich-Kwong :

$$f(Z) = ((Z - 1.0) \cdot Z - B) \cdot Z - A \quad 3)$$

donde A y B son constantes de la ecuación :

$$A = (A' \cdot P)^2 \cdot B' \quad 4)$$

$$B = (B' \cdot P)^2 + B' \cdot P - A'^2 \cdot P \quad 5)$$

donde :

$$A' = \sum_{i=1}^n \sqrt{\frac{T_{Ci}^{2.5}}{P_{Ci}}} \cdot y_i \quad 6)$$

$$B' = \sum_{i=1}^n \frac{T_{Ci}}{P_{Ci}} \cdot y_i \quad 7)$$

En estas últimas ecuaciones :

n : Es el número de componentes de la mezcla gaseosa.

T_{Ci} : Es la temperatura crítica del componente i.

P_{Ci} : Es la presión crítica del componente i, y

y_i : Es la fracción mol del componente i.

La temperatura de salida del gas se calcula con la ecuación :

$$T_s = T_e \cdot \left(\frac{P_s}{P_e} \right)^{\frac{k-1}{k \cdot \eta}} \quad 8)$$

donde :

T_e : Es la temperatura de entrada, en °R.

P_s : Es la presión de salida, en PSIA.

P_e : Es la presión de entrada, en PSIA.

k : Es el exponente adiabático, y

η : Es la eficiencia politrópica.

La cabeza politrópica es función de las temperaturas de entrada y de salida, así como del factor de compresibilidad promedio, de la constante del gas, del exponente adiabático y de la eficiencia politrópica :

$$H_p = (T_s - T_e) \cdot Z_m \cdot R' \cdot k \cdot \eta / (k - 1) \quad 9)$$

donde :

Z_m : Es el factor de compresibilidad medio y se calcula como la media aritmética entre el factor de compresibilidad en la salida y el factor de compresibilidad en la entrada.

R' : Es la constante del gas y se calcula como $15440/PMP_r$, - donde PMP es el peso molecular promedio, y

H_p : Es la cabeza politrópica, en ft.

El gasto volumétrico de entrada se calcula como :

$$Q_e = \frac{W \cdot Z_e \cdot R' \cdot T_e}{8640.0 \cdot P_e} \quad 10)$$

donde :

W : Es el gasto, en lb/hr, y

Q_e : Es el gasto volumétrico, en ft^3/min

El número de etapas del compresor depende de este gasto volumétrico y de la cabeza politrópica y se determina de la manera siguiente (1) :

$$N_e = 1.25 \times 10^{-4} \cdot H_p \quad \text{si } Q_e \leq 4000.0$$

$$\begin{aligned}
 N_e &= H_p / 8500.0 & \text{si } 4000.0 < Q_e \leq 12000.0 \\
 N_e &= H_p / 9000.0 & \text{si } Q_e > 12000.0
 \end{aligned}
 \tag{11}$$

La potencia al freno se calcula a partir de la cabeza politrópica como :

$$H_{pf} = \frac{W \cdot H_p}{\eta \cdot 1900000}
 \tag{12}$$

La presión de salida se puede calcular con la cabeza politrópica como :

$$P_s = \left(\frac{H_p \cdot (k - 1)}{k \cdot \eta \cdot Z_m \cdot R' \cdot T_e} + 1 \right)^{\frac{k \cdot \eta}{k - 1}} \cdot P_e
 \tag{13}$$

Finalmente, el gasto volumétrico de salida se calcula con la ecuación :

$$Q_s = \frac{Q_e \cdot P_e \cdot T_s \cdot Z_s}{P_s \cdot T_e \cdot Z_e}
 \tag{14}$$

METODO DE SOLUCION.

Se han visto las ecuaciones necesarias en el diseño y en la simulación de compresores centrífugos. En lo que sigue se plantearán los métodos para resolver estos problemas. Las ecuaciones son siempre las mismas, lo único que cambia es el orden en el que se emplean.

SIMULACION.

Lo que interesa en este caso es obtener una temperatura y una presión en la salida del compresor, para unas determinadas condiciones en la entrada y conociendo las características del equipo, es decir su cabeza politrópica, su potencia al freno y su número de etapas.

Los pasos que se siguen para poder obtener las condiciones de salida, involucran un proceso iterativo ya que la presión y la temperatura dependen una de otra como lo muestra la ecuación 8).

La secuencia de cálculo es la siguiente :

1. - Se calcula una presión de salida aproximada con la ecuación 13) empleando el factor de compresibilidad en la entrada, el cual se obtiene resolviendo las ecuaciones 3), 4), 5), 6) y 7) con las condiciones de entrada.
2. - Se calcula una temperatura de salida con la ecuación 8).
3. - Se calcula el factor de compresibilidad a la salida con las condiciones que se acaban de determinar en los pasos 1 y 2.
4. - Se calcula el factor de compresibilidad promedio, haciendo una media aritmética de los valores en la entrada y en la salida.
5. - Se calcula una nueva presión de salida con la ecuación 13).
6. - Se compara esta presión de salida con la anterior y si la diferencia es menor de una cierta tolerancia, se acaba el proceso iterativo; de no ser así, se vuelve al paso 2 a calcular una nueva temperatura de salida.

Una vez determinadas las condiciones de salida, se pueden calcular los gastos volumétricos de entrada y de salida con las ecuaciones 10)

y 14) respectivamente.

DISEÑO.

En este caso el cálculo es directo, ya que se conocen las condiciones de entrada y de salida y se trata de determinar las características del compresor. Los pasos que se siguen para lograr esto son :

Conociendo las condiciones a la entrada y a la salida, se calcula el factor de compresibilidad en ambos puntos y el valor medio; la temperatura de salida puede no tenerse como dato, pero se calcula fácilmente con la ecuación 8).

La cabeza politrópica puede entonces determinarse de una manera directa con la ecuación 9) y con este valor el número de etapas se puede obtener de las ecuaciones 11), con el gasto volumétrico obtenido de la ecuación 10).

También con el valor de la cabeza politrópica, se puede calcular de una manera directa la potencia al freno con la ecuación 12).

Finalmente, el gasto volumétrico de salida se obtiene de la ecuación 14).

De esta manera, con las ecuaciones planteadas anteriormente, se ve como se puede simular o diseñar un compresor centrífugo. Los dos problemas son bastante frecuentes en la ingeniería química, ya que este tipo de equipo es necesario en la gran cantidad de procesos en los cuales es necesario transportar gases.

DESCRIPCION DEL PROGRAMA

El programa COMPRESOR hace los cálculos de diseño y de simulación de un compresor centrífugo aplicando los procedimientos explicados antes en el Método de Solución; la opción de cálculo se da como dato en la primera tarjeta de datos en la variable OP (1 : diseño; 2 : simulación).

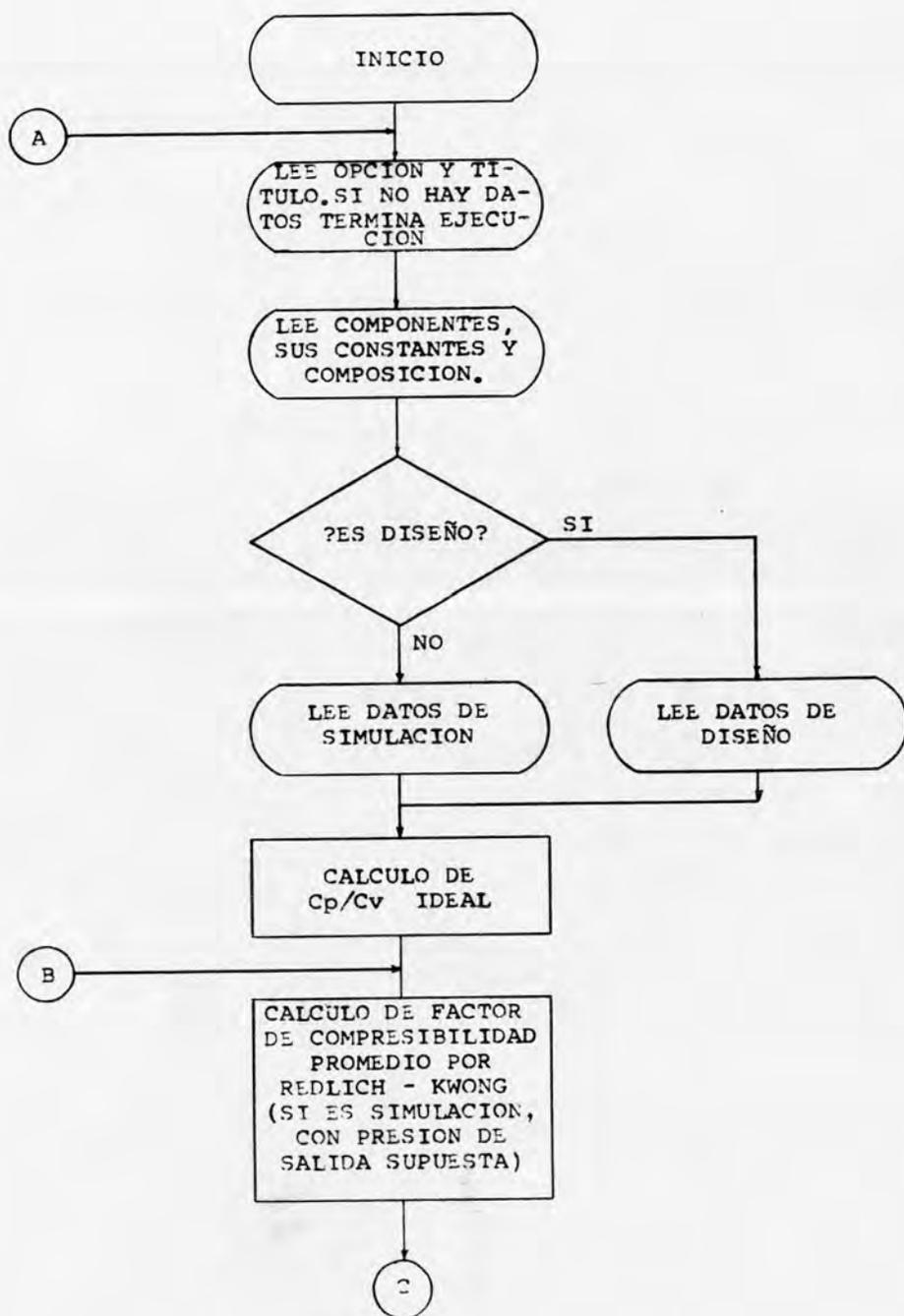
El cálculo del factor de compresibilidad se hace con la ecuación de Redlich y Kwong, la cual se resuelve con el método de Regula-Falsi.

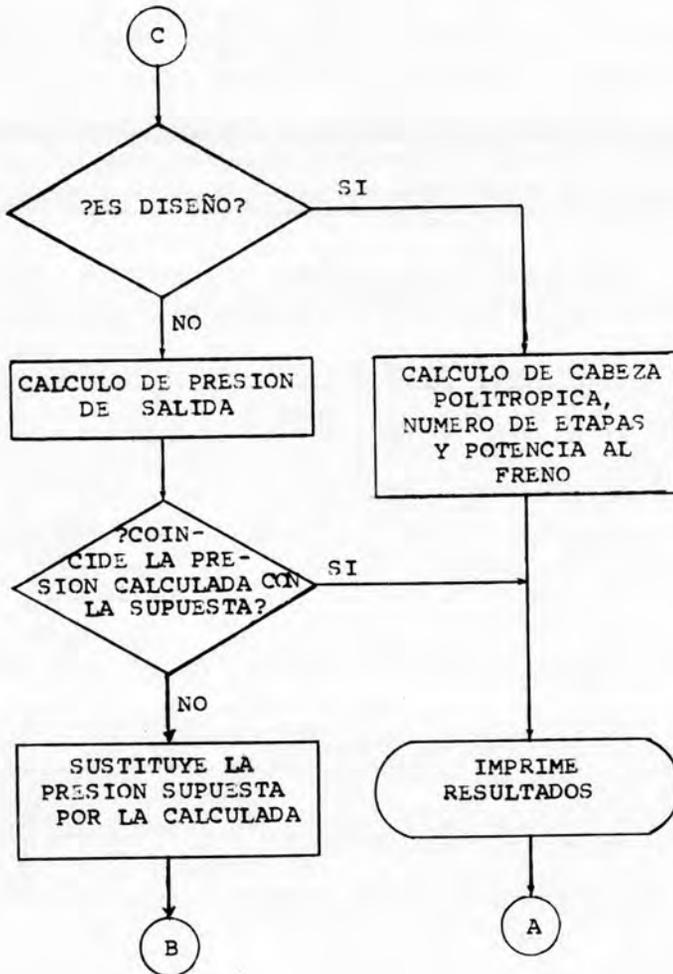
El programa llama a la subrutina REGULA (Sección III, Capítulo XVIII) y le manda como parámetro el nombre de la función que resuelve la ecuación (RK); para ello esta función se hace externa en el programa.

COMPRESOR tiene un bloque COMMON llamado BLOCK 1 con las constantes de la ecuación de Redlich y Kwong, las cuales se calculan antes de llamar a la subrutina REGULA.

El cálculo de la capacidad calorífica para la determinación del coeficiente adiabático, se hace directamente en el programa con la ecuación de la forma $A + BT + CT^2 + DT^3$ sin llamar a la subrutina CPENID (Sección 1, Capítulo IV) ya que solo se trata de gases; el cálculo solo se hace a la temperatura de entrada debido a que el coeficiente prácticamente no varía al variar la temperatura.

PROGRAMA DE DISEÑO Y SIMULACION
DE COMPRESORES
DIAGRAMA DE BLOQUES





ENTRADA DE DATOS.

Primera tarjeta :

NCOMP : Número de componentes. Especificación I 2.

OP : Opción de cálculo (1 : diseño; 2 : simulación). Especificación I 2.

TITULO : Identificación del problema. Especificación 19 A 4.

Segunda tarjeta (se ajusta al mismo formato que el capítulo IX) :

NOMBRE : Identificación del componente. Especificación 2 A 6.

PM : Peso molecular del componente. Especificación F 7.2.

TC : Temperatura crítica, °R. Especificación 6 X, F 6.1, es decir, cols. 26-31.

PC : Presión crítica, PSIA. Especificación F 6.0.

Tercera tarjeta (se ajusta el mismo formato que el capítulo IX) :

A : Constante de capacidad calorífica (cap. IV). Especificación F 8.5.

B : Constante de capacidad calorífica. Especificación F 9.7.

C, D : Constantes de capacidad calorífica. Especificación 2 E 11.4.

Se perforan tantos juegos como la segunda y tercera tarjetas como componentes existan.

Siguiente tarjeta :

Y : Vector de fracciones mol (tantas como componentes haya)

Formato libre.

Siguiente tarjeta (si es diseño) :

- T 1 : Temperatura de entrada, °R. Formato libre.
 P 1 : Presión de entrada, PSIA. Formato libre.
 P 2 : Presión de salida, PSIA. Formato libre.
 W : Gasto, en lb/hr. Formato libre.
 ETAP : Eficiencia politrópica (si se da cero, toma .72). Formato libre.

Siguiente tarjeta (si es simulación) :

- T 1 : Temperatura de entrada, °R. Formato libre.
 P 1 : Presión de entrada, PSIA. Formato libre.
 W : Gasto, en lb/hr. Formato libre.
 HP : Cabeza politrópica, ft. Formato libre.
 ETAP : Eficiencia politrópica (si no se da, supone .72). Formato libre.

RESULTADOS.

El programa imprimirá los siguientes resultados :

- El título que se haya dado al problema.
- En forma de tabla; para los diferentes componentes de la mezcla :
 - . El nombre del componente.
 - . Su peso molecular.
 - . Su temperatura crítica, en °R.
 - . Su presión crítica, en PSIA.
- En una segunda tabla :
 - . Las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica.

En el caso de diseño, imprimirá después :

- La eficiencia politrópica.
- El peso molecular promedio.
- La constante del gas.
- El coeficiente adiabático.
- La temperatura de entrada, en °R.
- La temperatura de salida, en °R.
- La presión de entrada, en PSIA.
- La presión de salida, en PSIA.
- El factor de compresibilidad promedio.
- La cabeza politrópica, en ft.
- El número de etapas.

- La potencia al freno, en HP.
- El gasto volumétrico de entrada, en ft^3/hr .
- El gasto volumétrico de salida, en ft^3/hr .

En el caso de simulación imprimirá :

- La eficiencia politrópica.
- El peso molecular promedio.
- La constante del gas.
- El coeficiente adiabático.
- El factor de compresibilidad promedio.
- La temperatura de entrada, en $^{\circ}\text{R}$.
- La temperatura de salida, en $^{\circ}\text{R}$.
- La presión de entrada, en PSIA.
- La presión de salida, en PSIA.
- El gasto volumétrico de entrada, en ft^3/hr .
- El gasto volumétrico de salida, en ft^3/hr .

PROGRAMA DE DISEÑO Y SIMULACION DE COMPRESORES
INDICE DE VARIABLES

A	: Constante de capacidad calorífica.
AC	: Constante para los cálculos con la ecuación de Redlich-Kwong.
ARK	: Constante de Redlich-Kwong.
B	: Constante de capacidad calorífica.
BC	: Constante para los cálculos con la ecuación de Redlich-Kwong.
BRK	: Constante de Redlich-Kwong.
C	: Constante de capacidad calorífica.
CP	: Capacidad calorífica molar.
D	: Constante de capacidad calorífica.
ETAP	: Eficiencia politrópica.
ETNN	: Número de etapas (valor real).
HP	: Cabeza politrópica, ft.
HPF	: Potencia al freno, HP.
K	: Relación C_p/C_v .
NCOMP	: Número de componentes.
NET	: Número de etapas (valor entero).
NOMBRE	: Identificación del componente.
OP	: Opción : OP = 1.0 - Diseño. OP = 2.0 - Simulación.

P 1	: Presión de entrada, PSIA.
P 2	: Presión de salida, PSIA.
Q 1	: Gasto volumétrico de entrada, ft^3/hr .
Q 2	: Gasto volumétrico de salida, ft^3/hr .
R	: Constante de los gases.
R 1	: Constante del gas.
R 2, R 3	: Constantes en el cálculo de Redlich-Kwong.
TC	: Temperatura crítica, °K.
TI	: Temperatura en °K.
TITULO	: Identificación del problema.
TS2	: Variable auxiliar para simulación.
T 1	: Temperatura inicial en °R.
T 2	: Temperatura de salida en °R.
W	: Gasto en lb/hr.
Y	: Fracción mol.
ZPROM	: Factor de compresibilidad promedio.
Z 1	: Factor de compresibilidad a la entrada.
Z 2	: Factor de compresibilidad a la salida.

EJEMPLO DE CALCULO

Supóngase que se desea comprimir una mezcla con la siguiente composición en fracción mol :

ETANO	.02
PROPANO	.95
n-BUTANO	.03

Las condiciones son las siguientes :

Gasto	105180 lb/hr.
Temperatura de entrada	40° F
Presión de entrada	20 psig.
Presión de salida	100 psig.

Para estas condiciones, el programa diseña un compresor de cuatro etapas, con una potencia al freno de 2347 Hp. El listado de resultados puede verse en las páginas siguientes.

IOJLQ(1),COMPRESOR

```

1 DIMENSION TITULO(19),NOMBRE(2,20),Y(20),PM(20),TC(20),PC(20),A(20)
2 I,B(20),C(20),D(20)
3 EXTERNAL RK
4 REAL K
5 COMMON /BLOCK1/ AC, BC
6 DATA R/1544.0/
7 1 READ(5,14,END=30) NCOMP,OP,TITULO
8 DO 2 I=1,NCOMP
9 2 READ(5,15) NOMBRE(1,I),NOMBRE(2,I),PM(I),TC(I),PC(I),A(I),B(I),
10 /C(I),D(I)
11 READ(5,28) (Y(I), I=1, NCOMP)
12 IF (OP.EQ.2.0) GO TO 3
13 READ(5,26) T1,P1,P2,w,ETAP
14 GO TO 4
15 3 READ(5,28) T1,P1,w,HP,ETAP
16 4 IF (ETAP .EQ. 0.0) ETAP = 0.72
17 C * CALCULO DEL FACTOR CP/CV *
18 PMP = 0.0
19 CP = 0.0
20 TI = T1/1.8
21 DO 5 I=1,NCOMP
22 PMP=PMP+PM(I)*Y(I)
23 5 CP = ((D(I)*TI + C(I))*T1 + B(I))*TI + A(I))*Y(I) + CP
24 R1=R/PMP
25 K=CP/(CP-1.96719)
26 C * CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD PROMEDIO, POR LA ECUACION DE RK *
27 ARK = 0.0
28 BRK = 0.0
29 DO 27 I=1, NCOMP
30 ARK = SQRT(TC(I)**2.5/PC(I))*Y(I) + ARK
31 27 BRK = TC(I)/PC(I)*Y(I) + BRK
32 ARK = ARK*0.6541*T1**(-1.25)
33 BRK = BRK*0.0867/T1
34 AC = (ARK*P1)**2*BRK
35 BC = (BRK*P1)**2 + BRK*P1 - ARK*ARK*P1
36 CALL REGULA(N1,RK,0.9,1.1,0.018,Z1,1E-7)
37 IF(OP.EQ.2) P2=(HP*(K-1.)/(K*ETAP*Z1*R1*T1)+1.0)**(K*ETAP/(K-1.))*P1
38 TS2 = T1
39 C * CALCULO DE LA TEMPERATURA DE SALIDA *
40 6 T2 = T1*(P2/P1)**((K-1)/(K*ETAP))
41 ARK = ARK*(TS2/T2)**1.25
42 BRK = BRK*TS2/T2
43 AC = (ARK*P2)**2*BRK
44 BC = (BRK*P2)**2 + BRK*P2 - ARK*ARK*P1
45 CALL REGULA(N12,RK,0.9,1.1,0.018,Z2,1E-7)
46 7 ZPROM=(Z1+Z2)*0.5
47 IF(OP.EQ.2.0) GO TO 8
48 C * CALCULO DE LA CABEZA POLITROPICA OPCION 1 *
49 HP = (T2 - T1)*ZPROM*R1*K*ETAP/(K-1)
50 C * CALCULO DEL NUMERO DE ETAPAS OPCION 1 *
51 Q1 = W*Z1*R1*T1/(8640.0*P1)
52 IF (Q1 .LE. 4E3) ETNN = 1.25E-4*HP
53 IF (Q1.GT.4E3 .AND. Q1.LE.12E3) ETNN = HP/8.5E3
54 IF (Q1 .GT. 12E3) ETNN = HP/9E3
55 NET=ETNN*0.9
56 C * CALCULO DE LA POTENCIA AL FRENO OPCION 1 *
57 HPF = W*HP/(LTAP*198000.0)
58 GO TO 9
59 C * CALCULO DE LA PRESION DE SALIDA OPCION 2 *
60 8 PS2 = (HP*(K-1.)/(K*ETAP*ZPROM*R1*T1)+1.0)**(K*ETAP/(K-1.))*P1

```

```

61     IF (ABS(PS2-P2) .LT. 2.0) GO TO 9
62     P2 = PS2
63     TS2 = T2
64     GO TO 6
65 C * CALCULO DE LOS GASTOS VOLUMETRICOS DE ENTRADA Y SALIDA *
66   9 IF (OP.EQ.2) G1 = W*Z1*R1*T1/(8640.0*P1)
67     Q1=G1*60.0
68     Q2 = Q1*P1*T2*(Z2/(P2*T1*Z1))
69     WRITE(6,20) TITULO
70     WRITE(6,23)
71     DO 10 I=1,NCOMP
72   10 WRITE (6,17) NOMBRE(1,I),NOMBRE(2,I),PM(I),TC(I),PC(I)
73     WRITE(6,24)
74     DO 21 I=1,NCOMP
75   21 WRITE (6,22) A(I),B(I),C(I),D(I)
76     IF (OP.EQ.2) GO TO 25
77     WRITE (6,18) ETAP, PMP,R1,K,T1,T2,P1,P2,ZPROM,HP,NET,HPF,Q1,Q2
78     GO TO 1
79   25 WRITE (6,19) ETAP, PMP,R1,K,ZPROM,T1,T2,P1,P2,Q1,Q2
80   26 GO TO 1
81   11 Z1=1
82     GO TO 6
83   12 Z2=1
84     GO TO 7
85   14 FORMAT(2I2,19A4)
86   15 FORMAT(2A6,F7.2,6X,2F6.0,/,F8.5,F9.7,2F11.4)
87   17 FORMAT(43X,2A6,6X,F6.2,5X,F7.2,5X,F7.2)
88   18 FORMAT(//,31X,'EFICIENCIA POLITROPICA',T85,F10.2,/,31X,'PESO MOLE
89     /CULAR PROMEDIO',T85,F10.2,/,31X,'CONSTANTE DEL GAS',T85,F10.2,/,31
90     /X,'COEFICIENTE ADIABATICO',T85,F10.2,/,31X,'TEMPERATURA DE ENTRADA
91     /',T85,F10.2,' G.R.',/,31X,'TEMPERATURA DE SALIDA',T85,F10.2,' G.R.
92     /',/,31X,'PRESION DE ENTRADA',T85,F10.2,' PSI',/,31X,'PRESION DE SA
93     /LIDA',T85,F10.2,' PSI',/,31X,'FACTOR DE COMPRESIBILIDAD PROMEDIO',
94     /T85,F10.2,/,31X,'CABEZA POLITROPICA',T85,F10.2,' FT',/,31X,'NUMERO
95     / DE ETAPAS',T85,I10,/,31X,'POTENCIA AL FRENO',T85,F10.2,' HP',/,31
96     /X,'GASTO DE ENTRADA',T85,F10.2,' FT**3/HR',/,31X,'GASTO DE SALIDA'
97     /,T85,F10.2,' FT**3/HR')
98   19 FORMAT(//,31X,'EFICIENCIA POLITROPICA',T85,F10.2,/,31X,'PESO MOLE
99     /CULAR PROMEDIO',T85,F10.2,/,31X,'CONSTANTE DEL GAS',T85,F10.2,/,31
100    /X,'COEFICIENTE ADIABATICO',T85,F10.2,/,31X,'FACTOR DE COMPRESIBILI
101    /DAD PROMEDIO',T85,F10.2,/,31X,'TEMPERATURA DE ENTRADA',T85,F10.2,'
102    / G.R.',/,31X,'TEMPERATURA DE SALIDA',T85,F10.2,' G.R.',/,31X,'PRES
103    /ION DE ENTRADA',T85,F10.2,' PSI',/,31X,'PRESION DE SALIDA',T85,F10.
104    /2,' PSI',/,31X,'GASTO DE ENTRADA',T85,F10.2,' FT**3/HR',/,31X,'GAST
105    /O DE SALIDA',T85,F10.2,' FT**3/HR')
106   20 FORMAT ('1',28X,19A4)
107   22 FORMAT(29X,4(E15.8,5X))
108   23 FORMAT(//,60X,'DATOS DEL GAS',//,44X,'COMPONENTE',8X,'P.M.',8X,'T.
109     /C.',8X,'P.C.',/)
110   24 FORMAT (//,59X,'CONSTANTES DE Cp',//,36X,'A',19X,'B',19X,'C',19X,'
111     /D',/)
112   28 FORMAT( )
113   29 FORMAT(4U12)
114   30 STOP
115     END

```

ES*RIUJLQ(1).RK

1
2
3
4
5

```
FUNCTION RK(Z)
COMMON /BLOCK1/ A, B
RK = ((Z-1.0)*Z - B)*Z - A
RETURN
END
```

DISEÑO DE UN COMPRESOR

DATOS DEL GAS

COMPONENTE	P.M.	T.C.	P.C.
ETANO	30.07	549.70	708.00
PROPANO	44.09	665.80	617.00
N-BUTANO	58.12	765.40	551.00

CONSTANTES DE CP

A	B	C	D
.12928500+01	.42535400-01	-.16569900-04	.20814800-08
-.10085700+01	.73149900-01	-.37888500-04	.76778200-08
-.58543300+00	.93586400-01	-.48482900-04	.97431800-08
EFICIENCIA POLITROPICA			.72
PESO MOLECULAR PROMEDIO			44.23
CONSTANTE DEL GAS			34.91
COEFICIENTE ADIABATICO			1.14
TEMPERATURA DE ENTRADA			500.00 G.R.
TEMPERATURA DE SALIDA			653.22 G.R.
PRESION DE ENTRADA			20.00 PSI
PRESION DE SALIDA			100.00 PSI
FACTOR DE COMPRESIBILIDAD PROMEDIO			.99
CABEZA POLITROPICA			31812.69 FT
NUMERO DE ETAPAS			4
POTENCIA AL FRENO			2347.12 HP
GASTO DE ENTRADA			621319.87 FT**3/HR
GASTO DE SALIDA			166719.82 FT**3/HR

CAPITULO XIV

DISEÑO Y SIMULACION DE CAMBIADORES DE CALOR.

PROGRAMA CAMCAL

Los cambiadores de calor de tubos y coraza se emplean en todos los procesos industriales en los que es necesario calentar o enfriar algún fluido y son de especial importancia en los procesos de refinación y petroquímicos.

El método y los criterios que se presentan en este capítulo, para diseñar un cambiador de calor de tubos y coraza, son los propuestos por Kern (1); el capítulo se divide en tres partes : diseño, simulación y apreciación de un cambiador de calor. En el diseño se verán los criterios para poder dimensionar el equipo teniendo las características de los fluidos y las condiciones de entrada y salida fijadas por el proceso; en la simulación se verá el método iterativo para poder obtener las temperaturas de salida, teniendo las características de los fluidos y modificando las condiciones de entrada; finalmente en la apreciación se analiza el problema de obtener una cierta transferencia de calor entre dos corrientes, teniendo el equipo.

En los tres casos, las ecuaciones son las mismas y lo único que cambia es el orden en el que se emplean.

ANALISIS MATEMATICO.

A continuación se verán las ecuaciones fundamentales para llevar a ca

bo una transferencia de calor en un cambiador de tubos y coraza :

Si Q es la cantidad de calor que se transfiere entre las dos corrientes, se tiene :

$$Q = W_1 C_{p1} (T_1 - T_2) = W_2 C_{p2} (t_2 - t_1) \quad 1)$$

donde :

W_1 : Es el gasto de la corriente caliente.

W_2 : Es el gasto de la corriente fría.

C_{p1} : Es la capacidad calorífica media de la corriente caliente.

C_{p2} : Es la capacidad calorífica media de la corriente fría.

T_1 y T_2 : Son las temperaturas de entrada y salida de la corriente caliente.

t_1 y t_2 : Son las temperaturas de entrada y salida de la corriente fría.

Tomando en cuenta al equipo, se tiene :

$$Q = U \cdot A \cdot LMTD \quad 2)$$

donde :

U : Es el coeficiente total de transferencia de calor.

A : Es el área de transferencia de calor, y

$LMTD$: Es la media logarítmica de las diferencias de temperaturas entre las dos corrientes.

El coeficiente total de transferencia de calor depende de las propiedades

des de los fluidos (capacidad calorífica, conductividad térmica, viscosidad), de su masa y de las dimensiones del equipo (diámetros de tubos y de coraza) :

$$U = \frac{h_{iO} \cdot h_o}{h_{iO} + h_o} \quad 3)$$

donde :

h_{iO} : Es el coeficiente de película del lado de los tubos, referido al diámetro externo, en BTU/hr-°F-ft², y

h_o : Es el coeficiente de película del lado de la coraza, en BTU/hr-°F-ft².

Estos coeficientes se calculan de la siguiente manera :

$$h_{iO} = 0.324 \cdot Re_T^{0.8} \cdot \left(\frac{Cp_T \cdot \mu_T}{k_T} \right)^{1/3} \cdot k_T / D_o \quad (2) \quad 4)$$

donde :

Re_T : Es el número de Reynolds en el lado de los tubos.

Cp_T : Es la capacidad calorífica en el lado de los tubos, en BTU/lb.

μ_T : Es la viscosidad en el lado de los tubos, en Cp.

k_T : Es la conductividad térmica en el lado de los tubos, en BTU/hr-ft² °F/ft.

D_o : Es el diámetro exterior de los tubos, en in.

$$h_o = 4.32 \cdot Re_s^{0.55} \cdot \left(\frac{Cp_s \cdot s}{k_s} \right)^{1/3} \cdot k_s / D_{es} \quad 5)$$

donde :

Re_S : Es el número de Reynolds en el lado de la coraza.

Cp_S : Es la capacidad calorífica en el lado de la coraza, en BTU/lb.

μ_S : Es la viscosidad en el lado de la coraza, en Cp.

k_S : Es la conductividad térmica en el lado de la coraza, en BTU/hr-°F-ft²/ft, y

De_S : Es el diámetro equivalente del lado de la coraza, en in.

El número de Reynolds está dado por la ecuación :

$$Re = 3.4443239 \times 10^{-2} \times D \times G / \mu \quad 8)$$

Para el lado de la coraza :

$$D = De_S$$

$$G = G_S$$

$$\mu = \mu_S$$

Para el lado de los tubos :

$$D = D_i \text{ (Diámetro interno de los tubos).}$$

$$G = G_t$$

$$\mu = \mu_T$$

La masa velocidad del fluido, tanto del lado de los tubos como de la coraza, interviene en el cálculo del número de Reynolds. Para poder determinar la masa velocidad es necesario calcular el área de flujo;

para el lado de los tubos, se toma el área interna de los mismos; para el lado de la coraza, el área depende del diámetro interno de la misma, del "Pitch", de la distancia entre las paredes de los tubos y del espaciado de los deflectores, y está dada por :

$$A_s = \frac{D_{si} \cdot C' \cdot B}{144.0 \cdot P_T} \quad 9)$$

donde :

- D_{si} : Es el diámetro interno de la coraza, en in.
 C' : Es la distancia entre las paredes de los tubos, en in.
 B : Es el espaciado de los deflectores, en in, y
 A_s : Es el área de flujo, en ft^2 .

El diámetro equivalente del lado de la coraza depende del radio hidráulico y éste depende a su vez del arreglo y del espaciado de los tubos; se obtiene una excelente correlación si el radio hidráulico se calcula a lo largo del eje mayor de los tubos. De esta manera, el diámetro equivalente para el lado de la coraza es :

$$D_{es} = 1.2732395 \cdot \frac{P_T^2 - 0.78539816 \cdot D_o^2}{D_o} \quad 10)$$

si el arreglo es en cuadro, y

$$D_{es} = 2.5464791 \cdot \frac{0.43 \cdot P_T - 0.39269908 \cdot D_o^2}{D_o} \quad 11)$$

si el arreglo es en triángulo.

donde :

- P_T : Es el "Pitch".

La media logarítmica de las diferencias de temperatura entre las dos corrientes está dada por :

$$LMTD = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1}} \quad (12)$$

Sin embargo, en los cambiadores de calor de tubos y coraza se tienen combinaciones de flujo en paralelo y en contracorriente y por lo tanto, esta media de temperaturas debe de ser corregida según sea el tipo de cambiador que se tenga.

El factor de corrección para la diferencia de temperaturas, está dado por :

$$F_T = \frac{\sqrt{R^2 + 1} \cdot \ln \left[\frac{1 - s}{1 - R_s} \right]}{(R - 1) \cdot \ln \frac{2 - s (R + 1 - \sqrt{R^2 + 1})}{2 - s (R + 1 + \sqrt{R^2 + 1})}} \quad (13)$$

para cambiadores con un paso por la coraza y dos o más pasos por los tubos (1), y

$$F_T = \frac{\sqrt{R^2 + 1} / (2 (R - 1)) \cdot \ln \left[\frac{1 - s}{1 - R_s} \right]}{\ln \frac{2/s - 1 - R + 2/s \cdot \sqrt{(1 - s) \cdot (1 - R_s) + \sqrt{R^2 + 1}}}{2/s - 1 - R + 2/s \cdot \sqrt{(1 - s) \cdot (1 - R_s) - \sqrt{R^2 + 1}}}} \quad (14)$$

para cambiadores con 2 pasos por la coraza y 4 o más pasos por los tubos (1).

donde :

$$R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1} = \frac{W_2}{W_1} \quad 15)$$

$$s = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - T_1} \quad 16)$$

Cuando un cambiador de calor está en funcionamiento, su eficiencia disminuye con el tiempo ya que las paredes de los tubos se incrustan y la transferencia de calor no es igual. El coeficiente total de transferencia de calor despejado de la ecuación 3) debe ser mayor al obtenido de la ecuación 2), de una manera tal que el calor se transfiera en cantidad suficiente durante un período de tiempo razonable. El exceso de superficie se puede representar por el factor de obstrucción R_d :

$$R_d = \frac{U_C - U_D}{U_C \cdot U_D} \quad 17)$$

donde :

U_C : Es el coeficiente total de transferencia de calor obtenido de la ecuación 3), y

U_D : Es el coeficiente total de transferencia de calor obtenido de la ecuación 2).

La temperatura de la pared de los tubos depende de la temperatura que se tenga en los dos fluidos y de los coeficientes de película h_o y h_{i0} :

$$t_w = t_m + \frac{h_o/\rho_s}{h_{io}/\rho_t + h_o/\rho_s} (T_m - t_m) \quad 18)$$

donde :

t_m : Es la temperatura promedio en el lado de los tubos.

T_m : Es la temperatura promedio en el lado de la coraza, y

ρ_s y ρ_t : Son factores de corrección por viscosidad para

h_o y h_{io} :

$$\rho_s = \left(\frac{\mu_s}{\mu_w} \right)^{0.14} ; \rho_t = \left(\frac{\mu_T}{\mu_w} \right)^{0.14}$$

donde :

μ_w es la viscosidad calculada a la temperatura de la pared t_w .

Las ecuaciones que se han presentado hasta el momento conciernen directamente a la transferencia de calor en los cambiadores de calor de tubos y coraza. Otro aspecto muy importante es la caída de presión tanto del lado de los tubos como del lado de la coraza :

Para el lado de la coraza :

$$\Delta P_s = \frac{f_s \cdot G_s^2 \cdot D_s \cdot N_{cs}}{5.22 \times 10^{10} \cdot D_{es} \cdot s_{gs} \cdot \rho_s} \quad 19)$$

donde :

f_s : Es el factor de fricción, el cual se calcula mediante una correlación de la gráfica de Kern (1), obtenida con el programa "AJUSTE", el cual se describe después.

$$f_s = e^{(-0.18752459 \cdot \log Re_s - 4.4335412)} \quad 20)$$

donde Re_s es el número de Reynolds por el lado de la coraza dado de la ecuación 8).

G_s : Es la masa velocidad por la coraza, en lb/hr-ft² :

$$G_s = W_1 / A_s$$

donde A_s es el area de flujo, dada por la ecuación 9).

D_s : Es el diámetro interno de la coraza, en in.

N_{cs} : Es el número de cruces del fluido en la coraza :

$$N_{cs} = 12.0 \cdot L_t / B$$

donde L_t es la longitud de los tubos, en ft, y

s_g : Es la densidad relativa del fluido en la coraza.

Para el lado de los tubos :

$$\Delta P_{tot} = \Delta P_t + \Delta P_r \quad 21)$$

donde :

$$\Delta P_t = \frac{f_t \cdot G_T^2 \cdot L_t \cdot N_p}{0.435 \times 10^{10} \cdot D_i \cdot S_{gt} \cdot \rho_t} \quad 22)$$

donde :

f_t : Es el factor de fricción en los tubos, el cual se calcula también por una correlación de la gráfica de Kern, obtenida con "AJUSTE".

$$f_t = e^{(-0.2439455 \cdot \log Re_T - 5.9051599)} \quad 23)$$

donde Re_T es el número de Reynolds por el lado de los tubos, obtenido de la ecuación 8).

G_T : Es la masa velocidad por los tubos, en lb/hr-ft².

$$G_T = W_2 / A_T$$

donde A_T es el área de flujo por los tubos.

L_T : Es la longitud de los tubos, en ft.

N_p : Es el número de pasos de los tubos.

D_i : Es el diámetro interno de los tubos, en in., y

S_{gT} : Es la densidad relativa del fluido en los tubos

$$\Delta P_r = \frac{4.6645681 \times 10^{-4} \cdot N_p^3 \cdot W_2^2}{\rho_T^2 \cdot A'^2 \cdot N_{TT}^2} \quad 24)$$

donde :

ρ_T : Es la densidad del fluido en los tubos, en lb/ft³

A' : Es el área de flujo por tubo, en in², y

N_{TT} : Es el número total de tubos en el cambiador.

La primera contribución, ΔP_t es debida a la caída de presión a lo largo de los tubos y la segunda, ΔP_r es debida a la caída de presión en los retornos.

Las ecuaciones que se han presentado hasta aquí son las necesarias para poder calcular la transferencia de calor y la caída de presión en cambiadores de coraza y tubos. La manera de emplearlas en cada uno de los tres casos : simulación, diseño y apreciación es diferente y este problema es el que se analiza a continuación.

METODO DE SOLUCION.

Habiéndose presentado las ecuaciones para calcular la transferencia de

calor y la caída de presión en cambiadores de calor de coraza y tubos, se verá la manera de emplearlas para el diseño, la simulación y la apreciación.

DISEÑO.

Tratándose de un cálculo de diseño de un equipo, en este caso se tienen como datos las condiciones de los fluidos, por los tubos y por la coraza en las entradas al cambiador y las condiciones que se requieren en las salidas, así como las caídas de presión permitidas en los dos lados.

El diseño está basado en los criterios dados por Kern (1) y son los siguientes :

- El cálculo se comienza siempre por los tubos; los tubos más comunes que se escogen son de 0.75 y 1 pulgadas con arreglo en cuadro.
- Si se tiene agua o vapor, se hacen pasar por los tubos. La corriente menos corrosiva va normalmente por la coraza.
- Se calculan las temperaturas medias en las dos corrientes.
- Se calcula el calor transferido mediante la ecuación 1).
- Se calcula la temperatura media logarítmica y el factor de corrección F_t mediante las ecuaciones 12), 13), 14), 15) y 16) y según sea el factor de corrección se escoge el número de pasos por la coraza.
- Se supone un coeficiente total de diseño de transferencia de calor y se escoge un factor de obstrucción, según los fluidos que se tengan.
- Se calcula el área de transferencia de calor con la ecuación 1).

- Con el área de transferencia y el tipo de tubos escogido se calcula un número de tubos.
- Según el arreglo y número mínimo de pasos por los tubos, se escoge el número de tubos más aproximado al calculado.
- Con el nuevo número de tubos, se calcula el coeficiente total de diseño de transferencia de calor.
- Se calculan los coeficientes de película h_{i0} y h_o con las ecuaciones 4) y 5).
- Si el coeficiente de película externo es menor que el coeficiente total de transferencia supuesto, se incrementa el número de pasos en los tubos y se vuelve a calcular un nuevo número de tubos, una nueva área y un nuevo coeficiente total de transferencia de calor.
- El espaciado máximo de los deflectores es igual al diámetro de la coraza y el mínimo es igual a la quinta parte del diámetro de la coraza o dos pulgadas (el menor de los dos valores).
- Se calcula el coeficiente total limpio de transferencia de calor con la ecuación 3).
- Se calcula el factor de obstrucción, R_d , con la ecuación 17).
- Si el factor de obstrucción es menor que el que se tenía originalmente, se incrementa toda la unidad o se disminuye el coeficiente total de diseño de transferencia de calor y se vuelve a comenzar desde el cálculo del área de transferencia de calor.
- Si el factor de obstrucción calculado es mucho más pequeño que el factor de obstrucción original, se vuelve a hacer el cálculo con :

$$U_D = \frac{1}{U_C} + R_d \text{ original.}$$

(donde U_C es el coeficiente total limpio de transferencia de calor).

- Se calcula la caída de presión por el lado de los tubos; si es muy grande (mayor que la permitida), se incrementa el número de tubos y se vuelve a hacer el cálculo.
- Se calcula la caída de presión por el lado de la coraza; si es muy grande (mayor que la permitida), se aumenta el espaciado de los de flectores y se vuelve a hacer el cálculo.

SIMULACION.

En la simulación se conoce el equipo y sus características, lo que se persigue en este caso es ver como cambian las condiciones de salida al modificar las de entrada; en el caso de un cambiador de calor, lo que se desea ver es como varía la cantidad de calor transferido teniendo el cambiador de calor y unas determinadas condiciones en las entradas.

Las condiciones en la salida no se conocen y la primera aproximación que se da para las temperaturas medias es suponerlas iguales a las de entrada. A estas temperaturas se calculan todas las propiedades con las cuales se pueden determinar los coeficientes de película con las ecuaciones 4) y 5). Se calculan también la temperatura de la pared con la ecuación 18) y los factores de corrección por viscosidad para los coeficientes de película.

Con estos valores se calcula el coeficiente total limpio de transferencia de calor con la ecuación 3) y un coeficiente total de diseño con la ecuación 17) ya que se conoce el factor de obstrucción.

Después de haberse calculado estos coeficientes, se estima una temperatura de salida del lado de la coraza, haciendo una media aritmética de las temperaturas de entrada del lado de los tubos y del lado de la coraza, con la cual se calcula una cantidad de calor transferido y una temperatura de salida del lado de los tubos, con la ecuación 1).

Teniendo las temperaturas se calcula la media logarítmica de las diferencias de temperaturas y conociendo el equipo se calculan el área de transferencia de calor y la cantidad de calor transferido. Se hace un promedio entre ésta última y la calculada anteriormente; si la diferencia entre este promedio y la última cantidad de calor calculada es menor que una cierta tolerancia, se considera que el resultado es correcto.

De no haberse cumplido con la tolerancia, se vuelven a determinar las temperaturas de salida y nuevas capacidades caloríficas a las temperaturas medias, tanto para el lado de la coraza como de los tubos (tomando en cuenta por qué lado circulan los fluidos, frío y caliente) con la ecuación 1) y el calor promedio obtenido anteriormente, y una nueva LMTD, con lo que se vuelve a determinar una cantidad de calor transferido. Se vuelve a calcular el calor promedio y se vuelve a compa

rar con esta última cantidad; este procedimiento se repite hasta cumplir con la tolerancia, después de lo cual se calculan las caídas de presión con las ecuaciones 19) y 21).

La cantidad de calor calculada originalmente, a partir del coeficiente total de diseño, depende directamente de las propiedades, las cuales dependen a su vez de la temperatura.

Lo ideal sería entonces calcular todas las propiedades a la nueva temperatura en cada iteración; sin embargo, este cálculo requiere de un tiempo de computadora mucho mayor y se consideró que la densidad, la viscosidad y la conductividad térmica no varían mucho con la temperatura, sobre todo en el caso de líquidos, y que el hacer una vez el cálculo a las condiciones de entrada era una buena aproximación.

La capacidad calorífica tampoco cambia mucho al cambiar la temperatura, pero esta variación sí se tomó en cuenta, ya que interviene directamente en el balance de calor, aunque si se observa la ecuación 1) se puede ver que el efecto de esta variable es muy poco en comparación con el efecto producido por la diferencia de temperaturas.

APRECIACION.

En este caso se conocen el equipo y las condiciones de entrada y de salida; los problemas de apreciación surgen cuando se tiene un cambiador de calor trabajando a unas ciertas condiciones y se desea que

trabaje a otras, ya sea que se instale en otro lugar o que cambien los fluidos a las condiciones necesarias en la entrada y en la salida. Si el factor de obstrucción calculado es menor que el factor de obstrucción dado, el cambiador no sirve para el nuevo servicio.

En este problema el cálculo es directo : teniéndose las temperaturas de entrada y de salida, se pueden calcular todas las propiedades a las temperaturas medias, la media logarítmica de las diferencias de temperaturas con la ecuación 12). Teniéndose el equipo, se puede calcular el área de transferencia de calor con la ecuación 2), después de haber hecho el balance de calor y el factor de corrección F_T para la LMTD.

Con las propiedades se pueden calcular los coeficientes de película con las ecuaciones 4) y 5). La temperatura de la pared también se puede determinar con la ecuación 18) y con ella los factores de corrección por viscosidad para los coeficientes de película.

El coeficiente total limpio de transferencia de calor se calcula con la ecuación 3) y el coeficiente total de diseño con la ecuación 2).

Finalmente, el factor de obstrucción se calcula con la ecuación 17) y con este resultado se establece si el cambiador de calor funciona para las nuevas condiciones o no; si es adecuado, las caídas de presión se calculan con las ecuaciones 19) y 21).

DESCRIPCION DEL PROGRAMA

El programa CAMCAL que se presenta en este capítulo hace el cálculo de diseño, simulación y apreciación de un cambiador de calor mediante una variable de control.

Para el caso de diseño, escoge los cambiadores posibles con un arreglo en cuadro con tubos de 0.75 de pulgada.

Las propiedades se calculan por medio de las subrutinas descritas en la primera sección :

CONDUC	:	Para la conductividad térmica.
BWRS y DENFUG	:	Para la densidad.
VISC	:	Para la viscosidad.
CPENID	:	Para la capacidad calorífica.

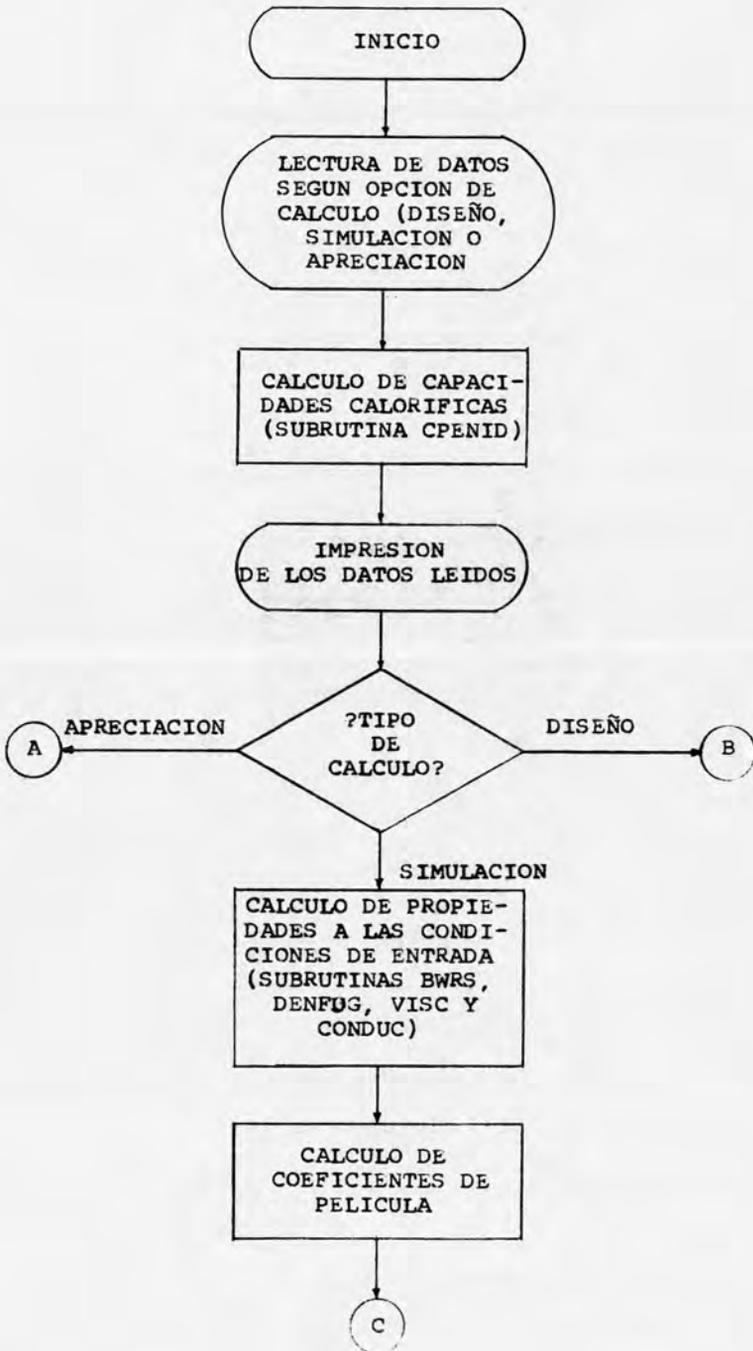
Los valores de las propiedades de los compuestos que se manejen en el cambiador llegan a las subrutinas mediante el bloque COMMON PROPS.

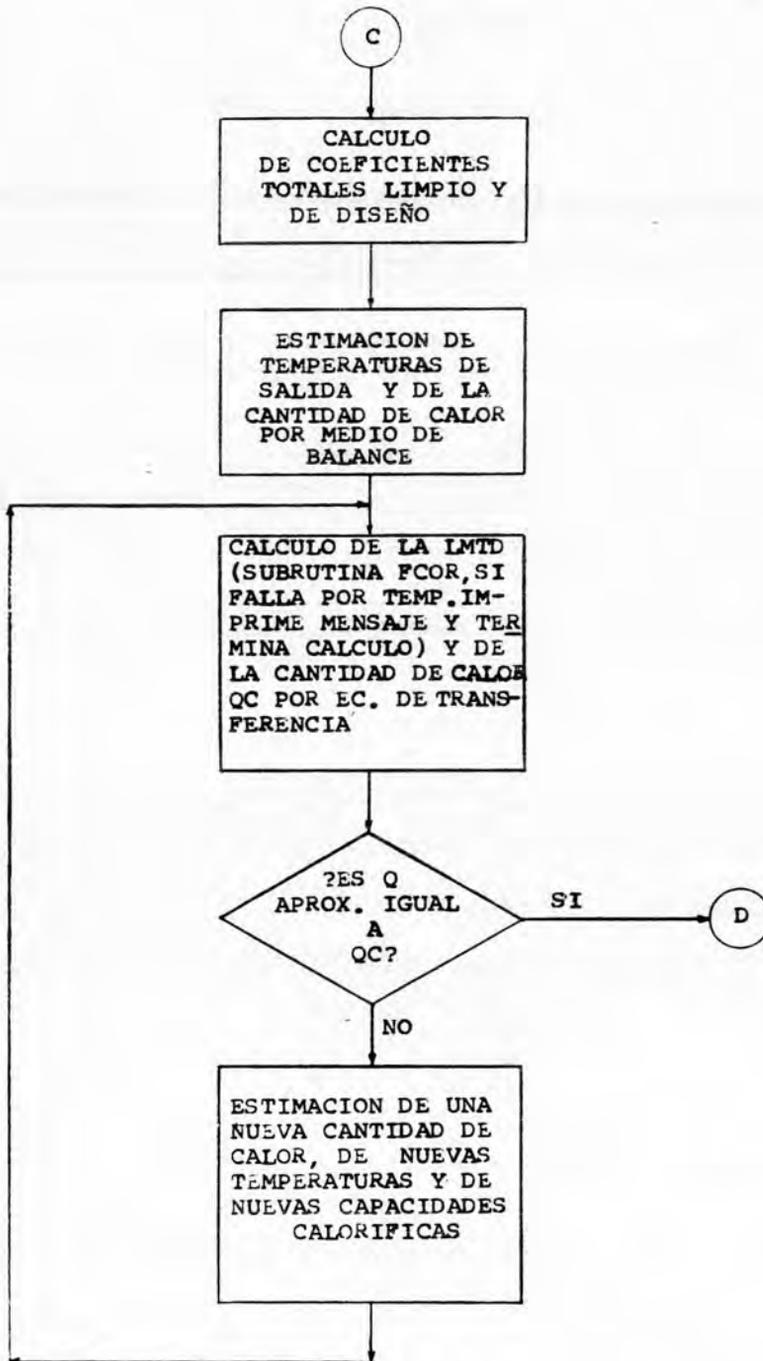
Como en este caso se tienen dos juegos de propiedades, uno para el lado de los tubos y el otro para el lado de la coraza, se emplea en el programa una matriz auxiliar de nombre VAUX y de dimensiones 20 y 2. Los valores que guarda esta matriz son los de las propiedades de todos los componentes de las dos corrientes; los valores se asignan a la matriz mediante una proposición EQUIVALENCE y antes de llamar a cualquier subrutina se hace la asignación, según sean las

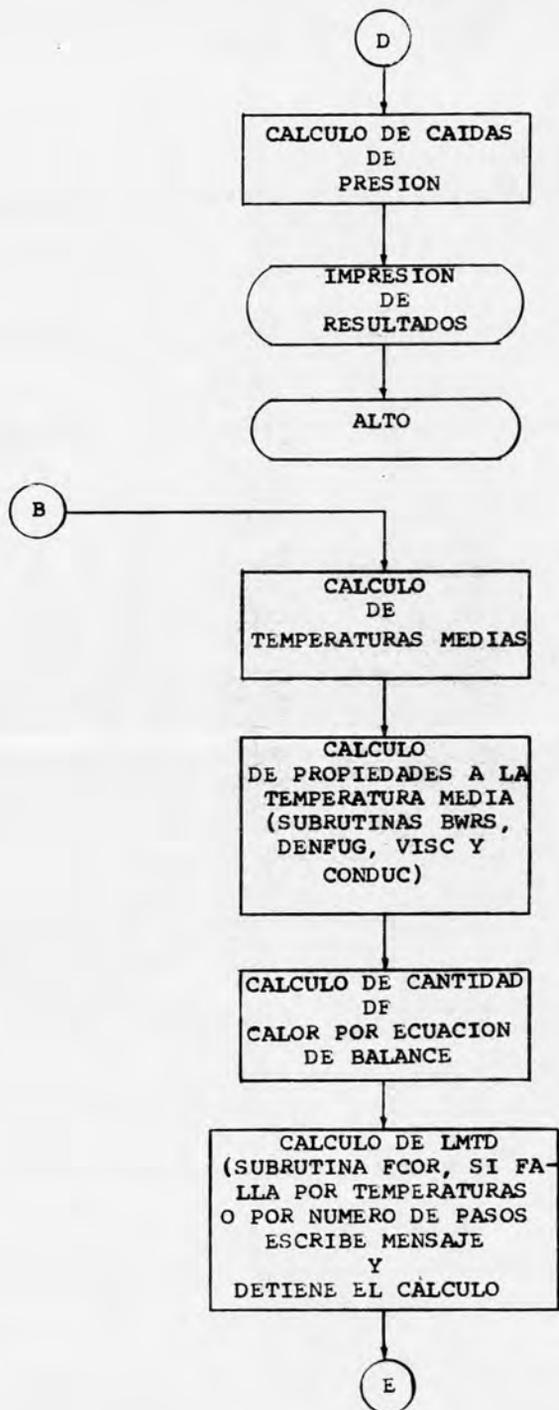
propiedades del lado de los tubos o de la coraza las que se deseen. Para hacer esta asignación se emplea un vector de 500 localidades con nombre AUX.

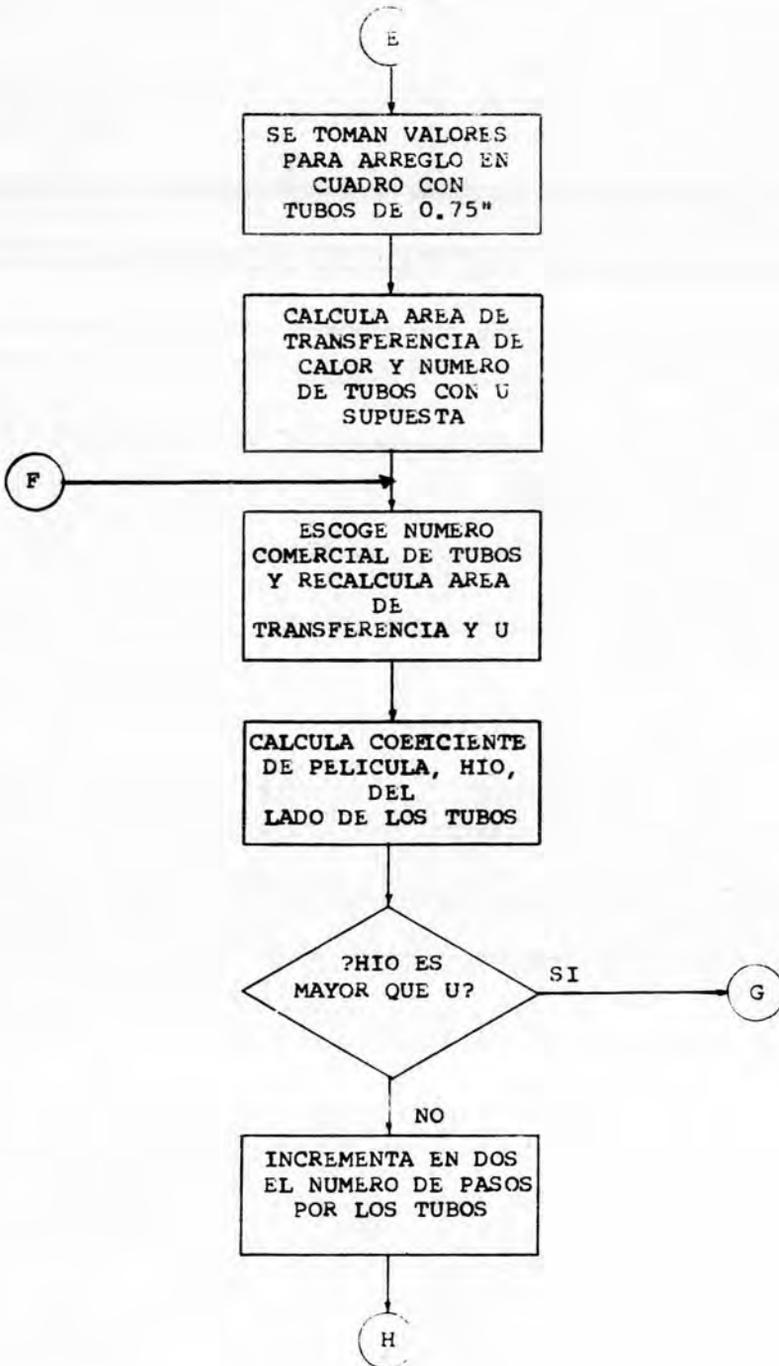
El factor de corrección F_T para la media logarítmica de las diferencias de temperatura, se calcula en la subrutina FCOR.

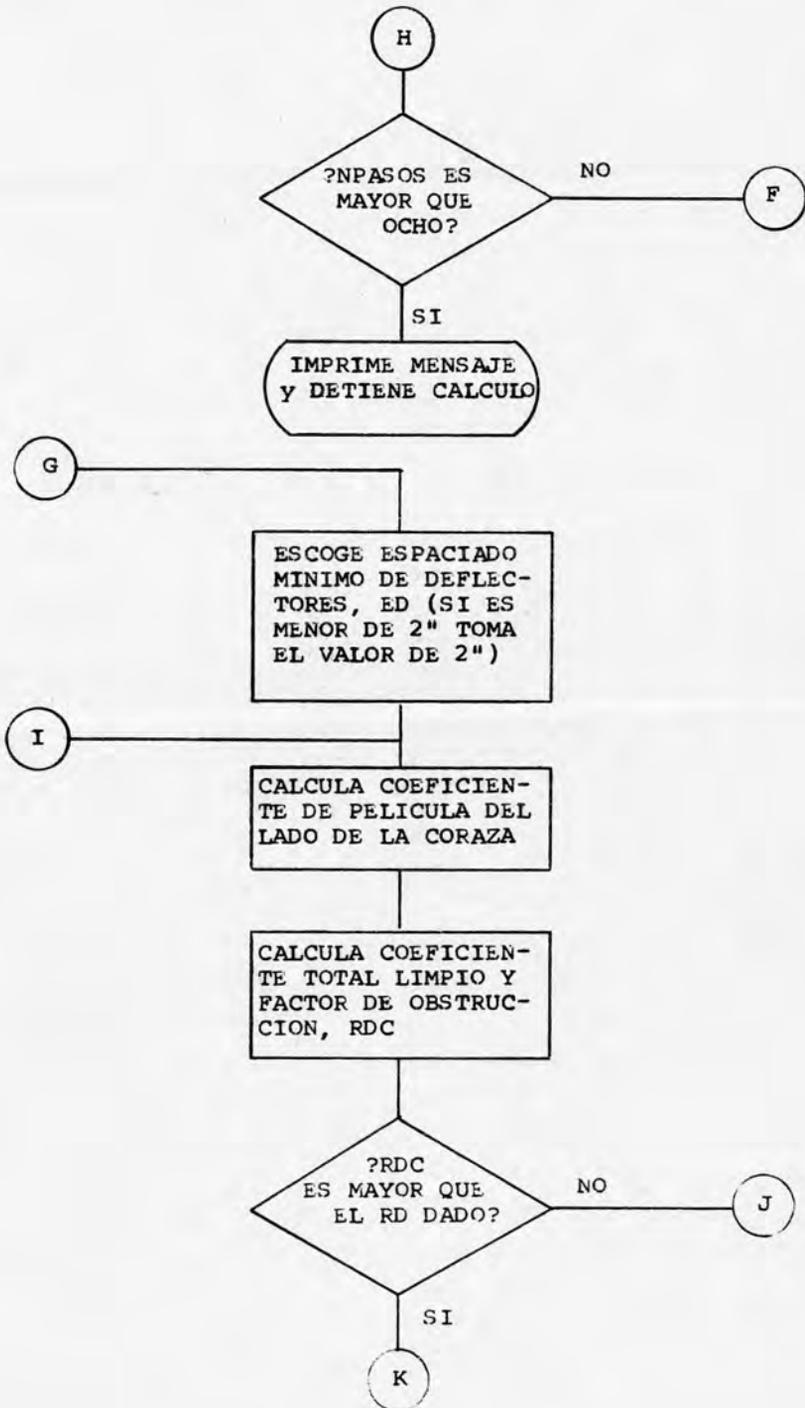
CAMCAL sigue paso a paso los algoritmos y los criterios descritos en el método de solución; si alguno de ellos falla, imprimirá un mensaje indicando el error y detendrá el cálculo. Las ecuaciones implementadas en el programa, son las descritas en el análisis matemático.

PROGRAMA CAMCAL
DIAGRAMA DE BLOQUES

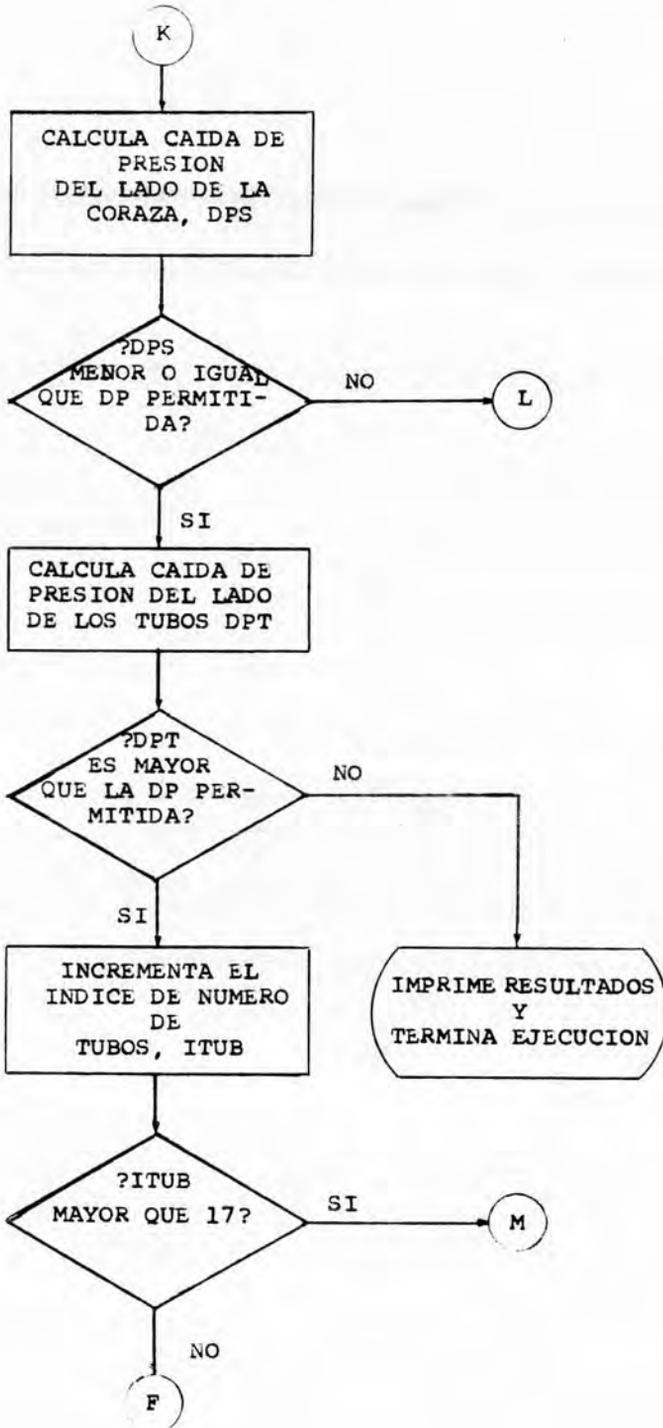


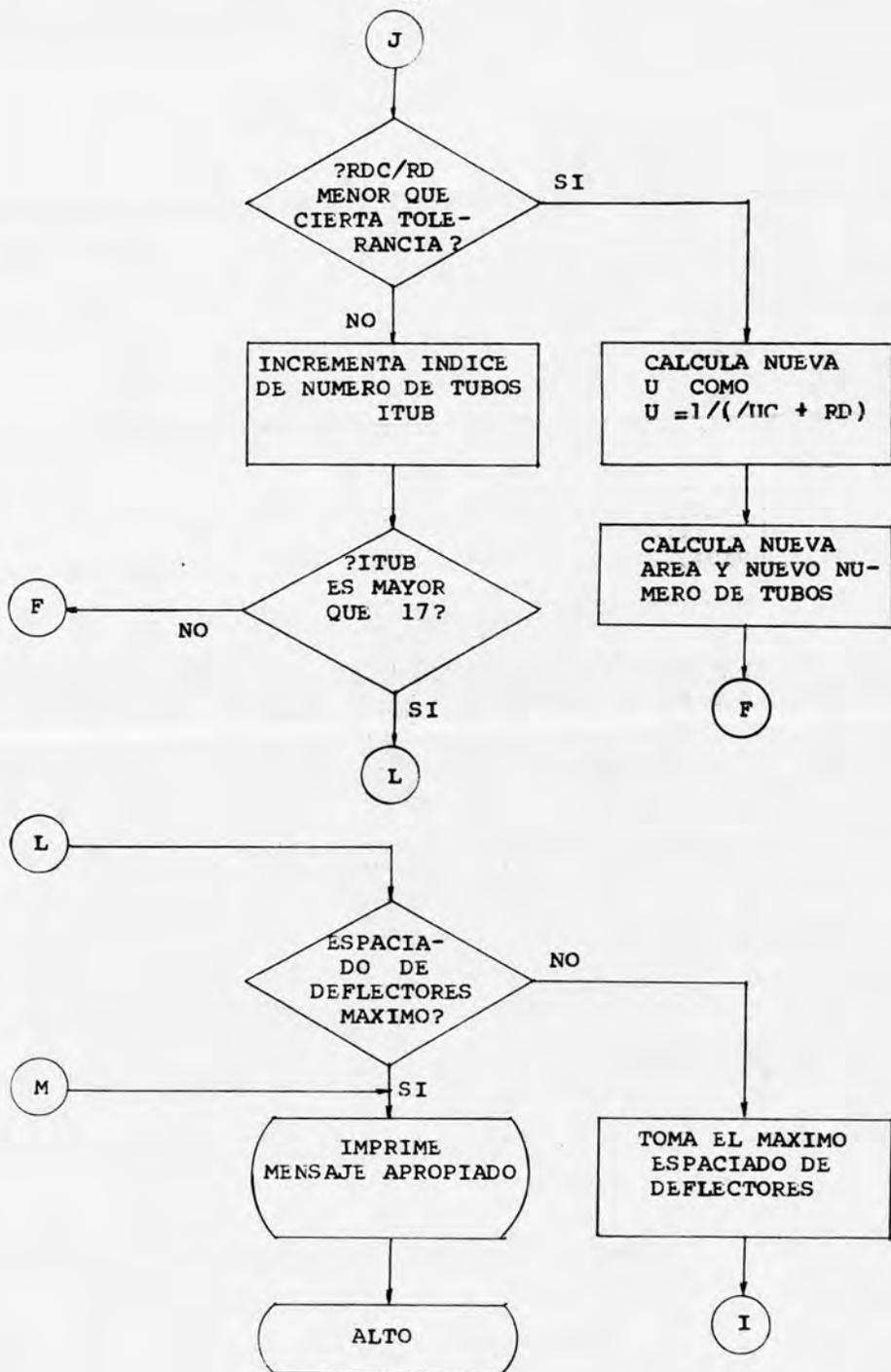


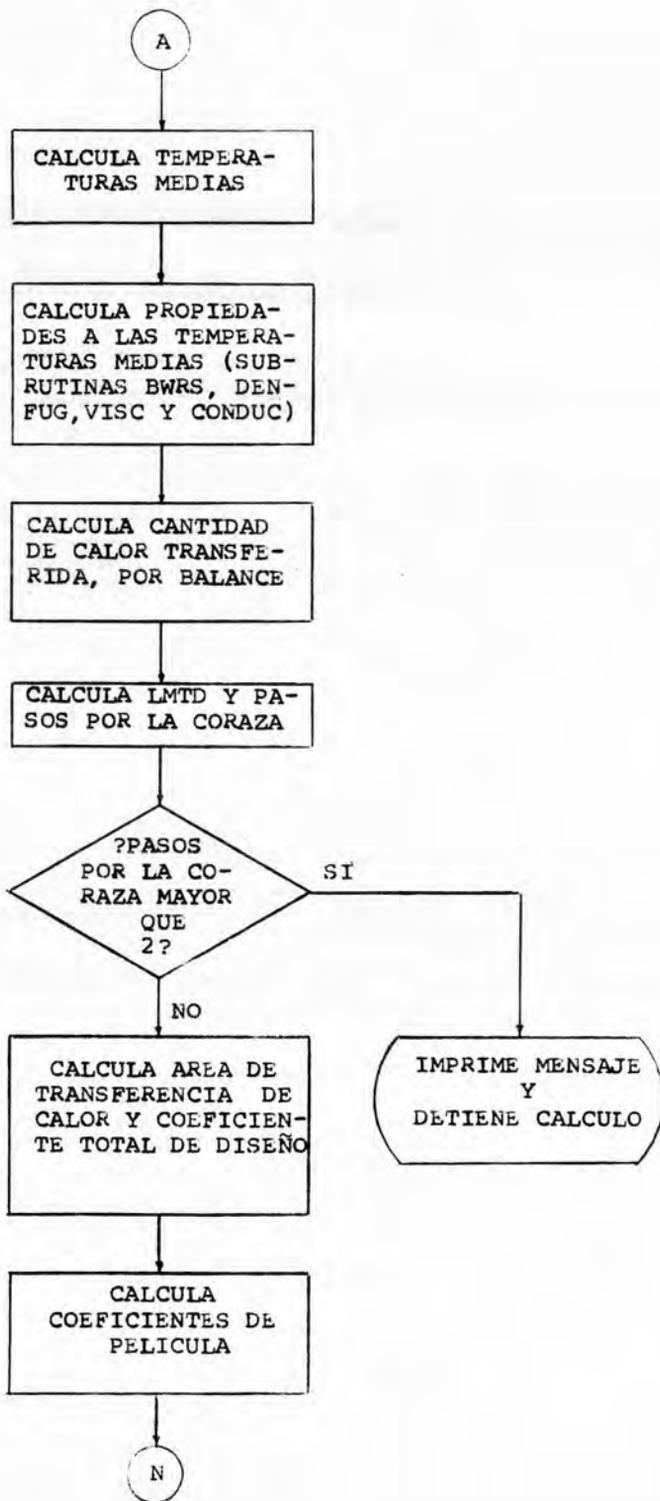




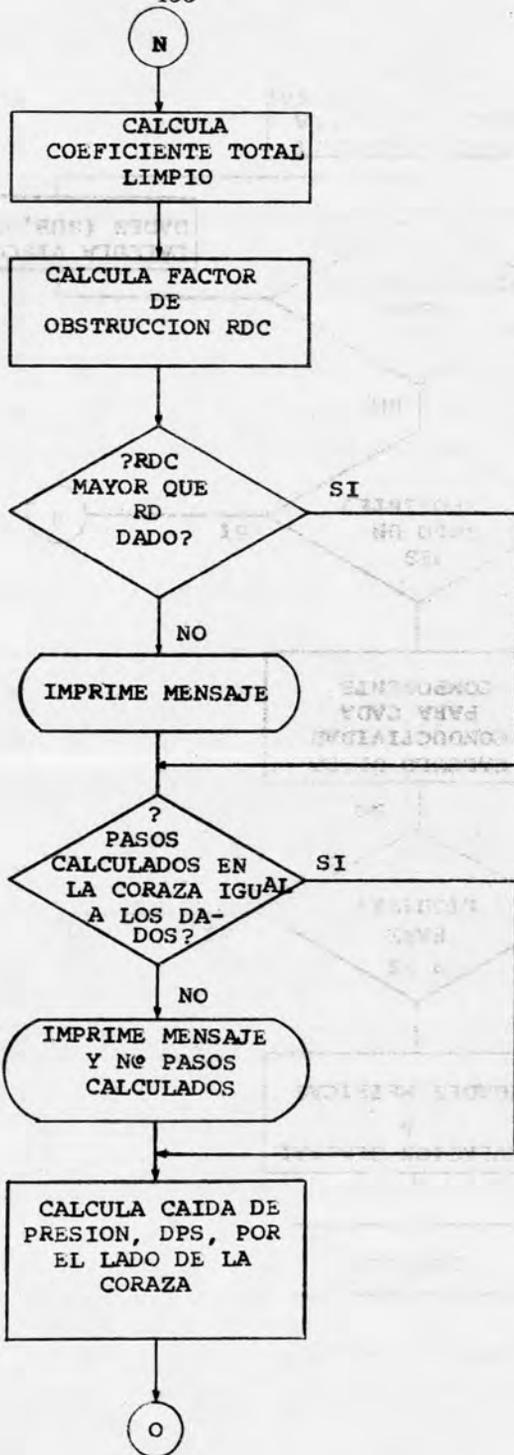
430







433



ENTRADA DE DATOS.

Los datos que lee el programa CAMCAL para llevar a cabo el cálculo de diseño, simulación o apreciación son :

En la primera tarjeta :

- OP : Opción de cálculo (1 : Diseño, 2 : Simulación, 3 : Apreciación) con una especificación I 2.
- NCOMP (1) : Número de componentes por el lado de la coraza, con una especificación I 2.
- NCOMP (2) : Número de componentes por el lado de los tubos, con una especificación I 2.
- NLG (1) : Fase por el lado de la coraza (1 : líquido, 2 : gas) con una especificación I 2.
- NLG (2) : Fase por el lado de los tubos (1 : líquido, 2 : gas) con una especificación I 2.
- FF : Variable de control para el lado por el que circula el fluido frío (0 : por los tubos, 1 : por la coraza) con una especificación I 2.
- TITULO : Título del problema con una especificación de 11 A 6, A 2.

En la segunda tarjeta : (Para Diseño y Apreciación) (En formato libre)

- WS : Gasto por el lado de la coraza, en lb/hr.
- WT : Gasto por el lado de los tubos, en lb/hr.

(Uno de los dos gastos puede ser cero).

- T 1 S : Temperatura de entrada por el lado de la coraza, en °R.
- T 2 S : Temperatura de salida por el lado de la coraza, en °R.
- T 1 T : Temperatura de entrada por el lado de los tubos, en °R.
- T 2 T : Temperatura de salida por el lado de los tubos, en °R.
- DPPS : Caída de presión permitida por el lado de la coraza, en PSI.
- DPPT : Caída de presión permitida por el lado de los tubos, en PSI.
- PS : Presión de operación por el lado de la coraza, en PSIA.
- PT : Presión de operación por el lado de los tubos, en PSIA.
- RD : Factor de obstrucción dado (total).
- U : Coeficiente total de transferencia de calor, en BTU/hr-ft²-°F. (En Apreciación se da un valor de 0.0).

En la segunda tarjeta : (Para Simulación) (En formato libre)

- WS : Gasto por el lado de la coraza, en lb/hr.
- WT : Gasto por el lado de los tubos, en lb/hr.
- T 1 S : Temperatura de entrada por el lado de la coraza, en °R.
- T 1 T : Temperatura de entrada por el lado de los tubos, en °R.
- DPPS : Caída de presión permisible por el lado de la coraza,

en PSI.

- DPPT : Caída de presión permisible por el lado de los tubos, en PSI.
- PS : Presión de operación en el lado de la coraza, en PSIA.
- PT : Presión de operación en el lado de los tubos, en PSIA.
- RD : Factor de obstrucción dado (total).

En la tercera tarjeta: (Para apreciación) (En formato libre)

- DET : Diámetro externo de los tubos, en in.
- DIT : Diámetro interno de los tubos, en in.
- APRIM : Area de flujo por un tubo, en in².
- ABPRIM : Area de transferencia de calor por pié lineal en un tubo, en ft²/ft lineal.
- CPRIM : Distancia entre los centros de los tubos, en in.
- BWG : Especificación de los tubos.
- LT : Longitud de los tubos, en ft.
- NTPT : Tipo de arreglo (1 : Cuadro, 2 : Triángulo)
- PTT : "Pitch", en in.
- NPASOS : Número de pasos por los tubos.
- NTD : Número de tubos.
- SDD : Diámetro de la coraza, en in.
- IPASO : Número de pasos por la coraza.
- ED : Espaciado de los deflectores.

En la tercera tarjeta : (Para Simulación) (En formato libre)

- IPASO : Número de pasos por la coraza.
- NPASOS : Número de pasos por los tubos.
- NTD : Número de tubos.
- LT : Longitud de los tubos, en ft.
- DET : Diámetro externo de los tubos, en in.
- DIT : Diámetro interno de los tubos, en in.
- APRIM : Area de flujo por un tubo, en in².
- ABPRIM : Area de transferencia de calor por pié lineal en un tubo, en ft²/ft lineal.
- CPRIM : Distancia entre los centros de los tubos, en in.
- BWG : Especificación de los tubos.
- NTPT : Tipo de arreglo (1 : Cuadro, 2 : Triángulo).
- PTT : "Pitch", en in.
- SDD : Diámetro de coraza, en in.
- ED : Espaciado de los deflectores, en in.

Deben codificarse tantas tercias de tarjetas 4, 5 y 6 (3, 4 y 5 para Diseño) (como las que siguen), como componentes haya del lado de la coraza.

En la cuarta tarjeta :

- COMP (I) : Nombre del componente con una especificación de 2A6.
- PMS (I) : Peso molecular, con una especificación de F 7.0.
- TEBS (I) : Temperatura de ebullición, en °R, con una especificaci

ción de F 7.0

- TCS (I) : Temperatura crítica, en °R, con una especificación de F 7.0.
- PCS (I) : Presión crítica, en PSIA, con una especificación de F 6.0.
- VCS (I) : Volumen crítico, en ft³/lb mol, con una especificación de F 6.0.
- ZCS (I) : Factor de compresibilidad crítico, con una especificación de F 6.0.
- FACS (I) : Factor acéntrico, con una especificación de F 6.0.
- CSS (I) : Constante de Souders, comenzando en la columna 70, con una especificación de F 6.1.

En la quinta tarjeta :

- AGS (I), BGS (I) : Constantes para la capacidad calorífica del gas
 CGS (I), DGS (I) y del líquido (dependiendo de la fase, las cuatro primeras o las cuatro últimas son cero),
 ALS (I), BLS (I) con especificaciones de F 10.0 (8 F 10.0).
 CLS (I), DLS (I)

En la sexta tarjeta :

- AKGS(I), BKGS (I) : Constantes para la conductividad térmica del gas
 CKGS(I), AKLS (I) y del líquido (dependiendo de la fase, las tres primeras o las tres últimas son cero), con especificaciones de F 10.0 (6 F 10.0).
 BKLS(I), CKLS (I)

Deben codificarse tantas tercias de tarjetas 7, 8 y 9 (6, 7 y 8 para Diseño) (como las que siguen), como componentes se tengan por el lado de los tubos.

En estas tarjetas se codifican las mismas variables con las mismas especificaciones que en las tarjetas 4, 5 y 6. Los nombres de las variables difieren de las anteriores (tarjetas 4, 5 y 6) en que la última letra es T en vez de S, indicando que son para el lado de los tubos.

En la décima tarjeta : (Novena para Diseño) (En formato libre)

ZS (I), I = 1, NCOMP (1) :

Fracciones mol de todos los componentes del lado de la coraza.

KTROLS (I), I = 1, NCOMP (1) :

Variables de control para el tipo de fluido en el cálculo de la viscosidad. (1 : Sustancias no polares, 2 : Sustancias polares con enlaces de hidrógeno, 3 : Sustancias polares sin enlaces de hidrógeno).

En la onceava tarjeta : (Décima para Diseño) (En formato libre)

Mismas variables que en la décima tarjeta pero para el lado de los tubos. (Los nombres de las variables cambian también en que terminan por T en vez de S).

RESULTADOS.

Después de haber hecho el cálculo, el programa CAMCAL imprimirá los resultados siguientes :

- El título que se haya dado al problema.
- Un título según la opción que se haya empleado (Diseño, Simulación o Apreciación).
- Las constantes físicas de todos los componentes del fluido que circule por la coraza, en el siguiente orden : (Una línea por ca da componente).
 - Nombre del componente.
 - El valor de la constante que indica el tipo de fluido en el cálculo de la viscosidad.
 - La fracción mol.
 - El peso molecular, en lb/lb-mol.
 - La temperatura de ebullición normal, en °R.
 - La temperatura crítica, en PSIA.
 - El volumen crítico, en ft³/lb-mol.
 - El factor de compresibilidad crítico.
 - El factor acéntrico.
 - La constante de Souders.
- Las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de los componentes del fluido que circule por la coraza, para la fase gaseosa y para la fase líquida. (Una línea para cada componente)

- Las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de los componentes del fluido que circule por la coraza, para la fase gaseosa y para la fase líquida. (Una línea para cada compomente).
- Los mismos datos que se acaban de describir pero para los componentes del fluido que circule por los tubos.

Después se imprimirán en una nueva hoja los resultados obtenidos por las subrutinas para las propiedades de mezcla, para el lado de la coraza primero y para el lado de los tubos :

- Capacidad calorífica de la mezcla, en BTU/lb.
- Conductividad térmica de la mezcla, en BTU/hr-ft²-°F.
- Viscosidad de la mezcla, en Cp.
- Densidad de mezcla, en lb/ft³.

Habiéndose escrito los valores de las propiedades, se imprimirán las características del cambiador y de los fluidos :

- Diámetro externo de los tubos, en in.
- Especificación de los tubos.
- Temperatura de entrada por el lado de los tubos, en °R.
- El número de Reynolds por el lado de los tubos.
- El diámetro interno de los tubos, en in.
- El tipo de arreglo (1 : Cuadro, 2 : Triángulo).
- Temperatura de salida por el lado de los tubos, en °R.
- El número de Reynolds por el lado de la coraza.

- El área de flujo por un tubo, en in^2 .
- El "Pitch", en in.
- La temperatura de entrada por el lado de la coraza, en $^{\circ}\text{R}$.
- El coeficiente de película externo, en $\text{BTU}/\text{hr}\text{-ft}^2\text{-}^{\circ}\text{R}$.
- El área de transferencia de calor por pie lineal en un tubo, en ft^2/ft .
- La longitud de los tubos, en ft.
- La temperatura de salida del lado de la coraza, en $^{\circ}\text{R}$.
- El coeficiente de película interno referido al lado externo, en $\text{BTU}/\text{hr}\text{-ft}^2\text{-}^{\circ}\text{F}$.
- La media logarítmica de las diferencias de temperaturas, en $^{\circ}\text{R}$.

Finalmente se imprimirán :

- El tipo de cambiador.
- El número de tubos.
- El calor transferido, en BTU/hr .
- El coeficiente total limpio de transferencia de calor, en $\text{BTU}/\text{hr}\text{-ft}^2\text{-}^{\circ}\text{F}$.
- El coeficiente total de diseño de transferencia de calor, en $\text{BTU}/\text{hr}\text{-ft}^2\text{-}^{\circ}\text{F}$.
- El factor de obstrucción total.
- La caída de presión por el lado de la coraza, en PSI.
- La caída de presión por el lado de los tubos, en PSI.

NOMENCLATURA DEL PROGRAMA

C A M C A L

- A : Area de transferencia de calor, en ft^2 .
- ABPRIM : Area de transferencia de calor por pie lineal en un tubo, en ft^2/ft lineal.
- AGS, BGS : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de gases para el lado de la coraza.
- CGS, DGS : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de gases para el lado de los tubos.
- AGT, BGT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de gases para el lado de los tubos.
- CGT, DGT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de gases para el lado de los tubos.
- AKGS, BKGS : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de gases para el lado de la coraza.
- CKGS : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de gases para el lado de la coraza.
- AKGT, BKGT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de gases para el lado de los tubos.
- CKGT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de gases para el lado de los tubos.
- AKLS, BKLS : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de líquidos para el lado de la coraza.
- CKLS : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de líquidos para el lado de la coraza.
- AKLT, BKLT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de líquidos para el lado de los tubos.
- CKLT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la conductividad térmica de líquidos para el lado de los tubos.

- ALS, BLS : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de líquidos para el lado de la coraza.
- CLT, DLT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de líquidos para el lado de los tubos.
- ALT, BLT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de líquidos para el lado de los tubos.
- CLT, DLT : Vectores que guardan las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de líquidos para el lado de los tubos.
- A PRIM : Area de flujo por un tubo, en in^2 .
- AS : Area de flujo por la coraza, en ft^2 .
- AT : Area de flujo por los tubos, en ft^2 .
- AUX : Vector que guarda los valores de todas las constantes de los componentes de las mezclas. (Se asignan los valores para el lado de la coraza o de los tubos antes de llamar a las subrutinas).
- BWG : Especificación de los tubos del cambiador.
- C PRIM : Distancia entre dos tubos, en in.
- CPS : Capacidad calorífica de la mezcla para el lado de la coraza, en $\text{BTU}/\text{lb mol} - ^\circ\text{F}$.
- CPT : Capacidad calorífica de la mezcla para el lado de los tubos, en $\text{BTU}/\text{lb mol} - ^\circ\text{F}$.
- CSS, CST : Vectores que guardan las constantes de Souders de los componentes, para el lado de la coraza y el lado de los tubos respectivamente.
- CTE : Matriz que guarda las constantes BWRS de todos los componentes.

CTEM	:	Vector que guarda las constantes BWRS de mezcla.
DELTAT	:	Media logarítmica de las diferencias de temperaturas (LMTD), en °R.
DENS	:	Vector que guarda las densidades de los componentes para la fase líquida (se emplean únicamente en la <u>sub</u> rutina VISC), en lb mol/ft ³
DENSS	:	Densidad de la mezcla para el lado de la coraza, en lb mol/ft ³ .
DENSSW	:	Densidad de la mezcla en la pared de los tubos para el lado de la coraza, en lb mol/ft ³ .
DENST	:	Densidad de la mezcla para el lado de los tubos, en lb mol/ft ³ .
DENSTW	:	Densidad de la mezcla en la pared de los tubos para el lado de los tubos, en lb mol/ft ³ .
DES	:	Diámetro equivalente de la coraza, en in.
DET	:	Diámetro exterior de los tubos, en in.
DIT	:	Diámetro interno de los tubos, en in.
DPPS	:	Caída de presión permisible del lado de la coraza, en PSI.
DPPT	:	Caída de presión permisible del lado de los tubos, en PSI.
DPR	:	Caída de presión en los retornos de los tubos, en PSI.
DPS	:	Caída de presión en la coraza, en PSI.
DPT	:	Caída de presión en los tubos, en PSI.

- DPTOT : Caída de presión total del lado de los tubos, en PSI.
- DS : Diámetro de la coraza, en in.
- ED : Espaciado de los deflectores, en in.
- FACS, FACT : Vectores que guardan los factores acéntricos de los componentes para el lado de la coraza y el lado de los tubos respectivamente.
- FF : Variable de control para el lado por el que circula la corriente fría :
- FF = 1 : La corriente fría va por la coraza.
- FF = 2 : La corriente fría va por los tubos.
- FFS, FFT : Factor de fricción por el lado de la coraza y de los tubos respectivamente.
- FT : Factor de corrección para la LMTD.
- GS, GT : Masa velocidad del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en lb/hr-ft².
- HIO : Coeficiente de película del lado de los tubos, referido al diámetro externo, en BTU/hr-ft²-°F.
- HIOC : Coeficiente de película del lado de los tubos, referido al diámetro externo corregido por viscosidad, en BTU/hr-ft²-°F.
- HO : Coeficiente de película del lado de la coraza, en BTU/hr-ft²-°F.
- HOC : Coeficiente de película del lado de la coraza corregido por viscosidad, en BTU/hr-ft²-°F.

- IC : Variable de control en la simulación.
 IC = 1 : Para la primera estimación.
 IC = 2 : Para las iteraciones posteriores.
- II : Número de pasos por la coraza, calculados por la subrutina FCOR.
- IPASO : Número de pasos por la coraza dados en la simulación y en la apreciación.
- ITUB : Subíndices en la elección del número de tubos y del diámetro de la coraza, en el diseño.
- KS, KT : Conductividades térmicas de la mezcla del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en $\text{BTU/hr-ft}^2\text{-}^\circ\text{F}$.
- KTROLS, KTROLT : Vectores que guardan las constantes de control para la polaridad de todos los componentes, del lado de la coraza y de los tubos respectivamente.
 = 1 Para compuestos no polares.
 = 2 Para compuestos polares sin puentes de hidrógeno.
 = 3 Para compuestos polares con puentes de hidrógeno.
- LG : Variable de control para la fase.
 = 1 Para fase líquida.
 = 2 Para fase gaseosa.
- LT : Longitud de los tubos, en ft.

- MUS, MUT : Viscosidades de la mezcla del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en Cp.
- MUSW, MUTW : Viscosidades de la mezcla en la pared, del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en Cp.
- M1 : Variable de control en la determinación del espaciado de los deflectores, en el diseño. (Si M1 es igual a 1 el espaciado de los deflectores es el máximo posible (igual al diámetro de la coraza); si es igual a 2 el cálculo se detiene, ya que no es posible tener un mayor espaciado).
- NC : Número de componentes en cualquiera de los dos lados. (Su valor se asigna antes de llamar a las subrutinas).
- NCOMP : Vector de dos elementos que guarda los números de componentes de las mezclas en los dos lados.
- NCS : Número de cruces del lado de la coraza.
- NLG : Vector de dos elementos que guarda las identificaciones de las fases para los dos lados :
 NLG = 1 Se tiene líquido.
 NLG = 2 Se tiene gas.
- NP : Subíndice en la elección del número de tubos, en el diseño.
- NPASOS : Número de pasos del lado de los tubos.
- NTD : Número de tubos dado en la simulación y en la apre

ciación.

- NTPT : Variable para el tipo de arreglo :
- NTPT = 1 : Arreglo en cuadro.
- NTPT = 2 : Arreglo en triángulo
- NTT : Número de tubos calculado, en el diseño.
- OP : Opción de cálculo :
- OP = 1 : Diseño.
- OP = 2 : Simulación.
- OP = 3 : Apreciación.
- PCS, PCT : Vectores que guardan las presiones críticas de los componentes, para el lado de la coraza y de los tu bos, en PSIA.
- PHIS, PHIT : Factores de corrección por viscosidad para los coe ficientes de película, para el lado de la coraza y de los tubos, respectivamente.
- PMPS, PMPT : Peso molecular promedio para el lado de la coraza y de los tubos, respectivamente.
- PMS, PMT : Vectores que guardan los pesos moleculares de los componentes, del lado de la coraza y de los tubos, respectivamente.
- PS, PT : Presión de operación del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en PSIA.
- PTT : "Pitch", en in.
- Q, QC : Calor transferido, en BTU/lb.

- R : Matriz que guarda los números comerciales de tubos para arreglo en cuadro con tubos de 0.75", para el caso de diseño.
- RD : Factor de obstrucción dado.
- RDC : Factor de obstrucción calculado.
- RES, RET : Número de Reynolds para el lado de la coraza y de los tubos respectivamente.
- RHOS, RHOT : Densidad de mezcla del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en lb/ft^3 .
- SDD : Diámetro de la coraza dado, en los casos de simulación y apreciación, en in.
- SDI : Vector que guarda los diámetros comerciales de co raza, en in.
- SS, ST : Densidad relativa del lado de la coraza y de los tu bos respectivamente.
- TCS, TCT : Vectores que guardan las temperaturas críticas de los componentes, del lado de la coraza y de los tu bos respectivamente, en °R.
- TEBS, TEBT : Vectores que guardan las temperaturas de ebullición normales, del lado de la coraza y de los tubos res pectivamente, en °R.
- TITULO : Título del problema.
- TPS, TPT : Temperatura media del lado de la coraza y de los tu bos respectivamente, en °R.

- TW : Temperatura de la pared, en °R.
- T1S, T1T : Temperatura de entrada del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en °R.
- T2S, T2T : Temperatura de salida del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en °R.
- U : Coeficiente total de diseño de transferencia de calor, en $\text{BTU/hr-ft}^2\text{-}^\circ\text{F}$.
- UC : Coeficiente total limpio de transferencia de calor, en $\text{BTU/hr-ft}^2\text{-}^\circ\text{F}$.
- VAUX : Matriz auxiliar para todas las constantes de todos los componentes de los dos lados; los valores para un lado o para el otro se asignan antes de llamar a las subrutinas; los elementos de esta matriz se hacen equivalentes a los elementos de los vectores de propiedades de los compuestos mediante una proposición EQUIVALENCE.
- VCS, VCT : Vectores que guardan los volúmenes críticos de los componentes, del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en $\text{ft}^3/\text{lb-mol}$.
- WS, WT : Gasto del lado de la coraza y de los tubos respectivamente, en lb/hr .
- ZCS, ZCT : Vectores que guardan los factores de compresibilidad críticos, del lado de la coraza y de los tubos respectivamente.
- ZS, ZT : Vectores de fracciones mol de los componentes, del lado de la coraza y de los tubos, respectivamente.

EJEMPLO DE CALCULO.

Para mostrar el empleo del programa CAMCAL se corrieron dos de las tres opciones : la de Diseño y la de Simulación.

EJEMPLO DE SIMULACION.

Se tiene un cambiador 1-4 con una coraza de 25.0 in y 220 tubos. El espaciado de los deflectores es de 9.25 in y los tubos son de 0.83 in de diámetro interno 14 BWG.

El cambiador de calor maneja un aceite caliente, el cual entra a 1135.67 °R por los tubos y un aceite frío que entra por la coraza a una temperatura de 786.67 °R.

Las caídas de presión permisibles, tanto para el lado de la coraza como para el de los tubos, son de 10 PSI; el factor de obstrucción total es de 0.004.

Las constantes para estos aceites son (llamando Fracción 1 : al que circula por la coraza y Fracción 2 : al que circula por los tubos) :

	PM	TEB	TC	PC
FRACCION 1	270.33	1089.0	1371.0	179.0
FRACCION 2	277.41	1100.0	1385.0	888.8

	VC	ZC	W	Cs
FRACCION 1	17.83	0.211	0.764	885.7
FRACCION 2	18.64	0.209	0.733	888.8
	AL	BL	CL	DL
FRACCION 1	0.33016	0.00064032	0.0	0.0
FRACCION 2	0.16485	0.000975	0.0	0.0
	AKL	BKL	CKL	
FRACCION 1	0.00040556	- 0.3369 x 10 ⁻⁶	0.0	
FRACCION 2	0.010173	- 0.1582 x 10 ⁻⁴	0.0	

EJEMPLO DE DISEÑO.

Se quiere diseñar un cambiador de calor que maneje los dos fluidos descritos en el ejemplo anterior (FRACCION 1 y FRACCION 2).

Las temperaturas requeridas son :

Temperatura de entrada por los tubos : 1135.67 °R

Temperatura de salida de los tubos : 1010.62 °R

Temperatura de entrada por la coraza : 786.67 °R

Temperatura de salida por la coraza : 937.11 °R

Las caídas de presión permitidas, tanto del lado de la coraza como de los tubos, son de 10 PSI. El factor de obstrucción total es de 0.004. El cálculo se inició con un coeficiente total de diseño de transferencia

de calor igual a $100 \text{ BTU/hr-ft}^2\text{-}^\circ\text{F}$.

El listado del programa CAMCAL y de la subrutina FCOR que calcula la media logarítmica de las diferencias de temperatura, así como los resultados de los dos ejemplos aparecen más adelante.

(Los listados de las subrutinas que calculan las propiedades aparecen en los capítulos en los cuales se describen).

ES*RIOJLQ(1),CAMCAL

```

1  DIMENSION NLG(2),NCOMP(2),S0I(17),VAUX(500,2),ZS(20),ZT(20),FL(20)
2  /,VISCS(20),VISCT(20),TITULO(12)
3  DIMENSION PMS(20),TEBS(20),TCS(20),PCS(20),VCS(20),ZCS(20),FACS(20)
4  /,CSS(20),AGS(20),BGS(20),CGS(20),DGS(20),ALS(20),BLS(20),CLS(20),
5  /,DLS(20),AKGS(20),BKGS(20),CKGS(20),AKLS(20),BKLS(20),CKLS(20)
6  DIMENSION PMT(20),TEBT(20),TCT(20),PCT(20),VCT(20),ZCT(20),FACT(20)
7  /,CST(20),AGT(20),BGT(20),CGT(20),DGT(20),ALT(20),BLT(20),CLT(20),
8  /,DLT(20),AKGT(20),BKGT(20),CKGT(20),AKLT(20),BKLT(20),CKLT(20)
9  DIMENSION DENSS(20),DENST(20),DENSSW(20),DENSTW(20)
10 INTEGER OP,FF,R(17,5)
11 DATA R/32,52,81,97,137,177,224,277,341,413,481,553,657,749,845,934
12 /,1049,26,52,76,90,124,166,220,270,324,394,460,526,640,718,824,914,
13 /,1024,20,40,68,82,116,158,204,246,308,370,432,490,600,688,790,886,9
14 /,82,20,36,68,76,108,150,192,240,302,356,420,468,580,676,766,866,968
15 /,1,1,60,70,108,142,188,234,292,346,408,456,560,648,748,838,948/,50
16 /,1/8,0,10,0,12,0,13,25,15,25,17,25,19,25,21,25,23,25,25,0,27,0,29,0
17 /,31,0,33,0,35,0,37,0,39,0/
18 COMMON/PROPS/COMP(2,20),AUX(500)
19 COMMON/CVISC/DENS(20)
20 COMMON/CBWS/LG,NC,CTE(20,11),CTEM(11)
21 REAL MUS,MUT,MUSW,MUTW,LT,KT,KS,KTROLS(20),KTROLT(20)
22 EQUIVALENCE (PMS,VAUX(1,1)),(TCS,VAUX(41,1)),(PCS,VAUX(61,1)),(VCS
23 /,VAUX(81,1)),(ZCS,VAUX(101,1)),(FACS,VAUX(121,1)),(CSS,VAUX(181,1)
24 /),(AGS,VAUX(201,1)),(BGS,VAUX(221,1)),(CGS,VAUX(241,1)),(DGS,VAUX(
25 /,261,1)),(ALS,VAUX(281,1)),(BLS,VAUX(301,1)),(CLS,VAUX(321,1)),(DLS
26 /,VAUX(341,1)),(AKGS,VAUX(381,1)),(BKGS,VAUX(401,1)),(CKGS,VAUX(421
27 /,1)),(AKLS,VAUX(441,1)),(BKLS,VAUX(461,1)),(CKLS,VAUX(481,1)),(TEB
28 /,VAUX(21,1)),(KTROLS,VAUX(141,1))
29 EQUIVALENCE (PMT,VAUX(1,2)),(TCT,VAUX(41,2)),(PCT,VAUX(61,2)),(VCT
30 /,VAUX(81,2)),(ZCT,VAUX(101,2)),(FACT,VAUX(121,2)),(CST,VAUX(181,2)
31 /),(AGT,VAUX(201,2)),(BGT,VAUX(221,2)),(CGT,VAUX(241,2)),(DGT,VAUX(
32 /,261,2)),(ALT,VAUX(281,2)),(BLT,VAUX(301,2)),(CLT,VAUX(321,2)),(DLT
33 /,VAUX(341,2)),(AKGT,VAUX(381,2)),(BKGT,VAUX(401,2)),(CKGT,VAUX(421
34 /,2)),(AKLT,VAUX(441,2)),(BKLT,VAUX(461,2)),(CKLT,VAUX(481,2)),(TEB
35 /,VAUX(21,2)),(KTROLT,VAUX(141,2))
36 LG = 1
37 READ(5,94) OP,NCOMP,NLG,FF,TITULO
38 IF(OP = 2) 1,2,1
39 1 READ(5,93) WS,WT,T1S,T2S,T1T,T2T,DPPS,DPPT,PS,PT,RO,U
40 IF(OP.EQ.3) READ(5,93) DET,DIT,APRIM,ABPRIM,CPRIM,BWG,LT,NTPT,PTT,
41 /,NPASO,NTD,SDD,IPASO,ED
42 TPS = (T1S + T2S)*0.5
43 TPT = (T1T + T2T)*0.5
44 GO TO 3
45 2 READ(5,93) WS,WT,T1S,T1T,DPPS,DPPT,PS,PT,RO
46 READ(5,93) IPASO,NPASO,NTD,LT,DET,DIT,APRIM,ABPRIM,CPRIM,BWG,NTPT
47 /,PTT,SDD,ED
48 TPS = T1S
49 TPT = T1T
50 N1 = NCOMP(1)
51 DO 4 I = 1,N1
52 4 READ(5,95) COMP(1,I),COMP(2,I),PMS(I),TEBS(I),TCS(I),PCS(I),VCS(I)
53 /,ZCS(I),FACS(I),CSS(I),AGS(I),BGS(I),CGS(I),DGS(I),ALS(I),BLS(I),C
54 /,LS(I),DLS(I),AKGS(I),BKGS(I),CKGS(I),AKLS(I),BKLS(I),CKLS(I)
55 READ(5,93) ZS(I),I=1,N1),(KTROLS(I),I=1,N1)
56 WRITE(6,81) TITULO
57 IF(OP=2) 103,104,105
58 103 WRITE(6,82)
59 GO TO 106
60 104 WRITE(6,83)

```

```

61      GO TO 10b
62      105 WRITE(6,84)
63      106 WRITE(6,121)
64      WRITE(6,87)(COMP(1,I),COMP(2,I),KTROLS(I),ZS(I),PMS(I),TERS(I),TCS
65      /(I),PCS(I),VCS(I),ZCS(I),FACS(I),CSS(I),I=1,N1)
66      WRITE(6,88)(AGS(I),HGS(I),CGS(I),DGS(I),ALS(I),BLS(I),CLS(I),DLS(I
67      /),I=1,N1)
68      WRITE(6,89)(AKGS(I),BKGS(I),CKGS(I),AKLS(I),BKLS(I),CKLS(I),I = 1
69      /,N1)
70      N2 = NCOMP(2)
71      DO 5 I = 1,N2
72      5 READ(5,95)COMP(1,I),COMP(2,I),PMT(I),TEBT(I),TCT(I),PCT(I),VCT(I),
73      /ZCT(I),FACT(I),CST(I),AGT(I),BGT(I),CGT(I),DGT(I),ALT(I),BLT(I),CL
74      /T(I),DLT(I),AKGT(I),BKGT(I),CKGT(I),AKLT(I),BKLT(I),CKLT(I)
75      READ(5,93)(ZT(I),I=1,N2),(KTROLT(I),I=1,N2)
76      DO 131 I=1, N1
77      131 PMS = PMS(I)*ZS(I) + PMPS
78      DO 132 I=1, N2
79      132 PMPT = PMT(I)*ZT(I) + PMPT
80      6 DO 100 I=1,500
81      100 AUX(I)=VAUX(I,1)
82      IF(IC,EQ.2) GO TO 24
83      WRITE(6,86)
84      WRITE(6,87)(COMP(1,I),COMP(2,I),KTROLT(I),ZT(I),PMT(I),TEBT(I),TC
85      /T(I),PCT(I),VCT(I),ZCT(I),FACT(I),CST(I),I = 1,N2)
86      WRITE(6,88)(AGT(I),BGT(I),CGT(I),DGT(I),ALT(I),BLT(I),CLT(I),DLT(
87      /I),I = 1,N2)
88      WRITE(6,89)(AKGT(I),BKGT(I),CKGT(I),AKLT(I),BKLT(I),CKLT(I),I = 1
89      /,N2)
90      24 CALL CPENID(NCOMP(1),TPS,ZS,ZS,NLG(1),FL,CPS,CPS)
91      CPS = CPS/PMPS
92      IF(IC,EQ.2) GO TO 8
93      141 DO 101 I=1,500
94      101 AUX(I)=VAUX(I,2)
95      CALL CPENID(NCOMP(2),TPT,ZT,ZT,NLG(2),FL,CPT,CPT)
96      CPT = CPT/PMPT
97      IF(IC,EQ.2) GO TO 25
98      IF(OP - 2)22,26,22
99      7 T2S = (T1S+T1T)*0.5
100      Q = WS*CPS*(T1S-T2S)
101      A = ABPRIM*NTD*LT
102      IC = 2
103      8 T2T = Q/(WT*CPT) + T1T
104      TPT = (T1T + T2T)*0.5
105      GO TO 141
106      25 CALL FCOR(N57,T1S,T2S,T1T,T2T,DELTAT,FT,II)
107      QC = U*A*DELTAT
108      Q = (QC + ABS(Q))*0.5
109      IF(ABS(QC - Q).LT.0.05*Q) GO TO 109
110      IF(FF,EQ.1) Q = -Q
111      T2S = T1S - Q/(WS*CPS)
112      TPS = (T1S + T2S)*0.5
113      GO TO 6
114      22 TPS = (T1S + T2S)*0.5
115      TPT = (T1T + T2T)*0.5
116      26 DO 27 I = 1,500
117      27 AUX(I) = VAUX(I,1)
118      IF(NLG(1).GT.1) GO TO 30
119      NC=NCOMP(1)
120      CALL B*RS
121      DO 29 I = 1,N1

```

```

122      DO 28 J = 1,11
123      28 CTEM(J) = CTE(I,J)
124      CALL DENFUG(ZS,PS,TPS,DENSS(I),FL,2,NLG(1))
125      29 DENS(I) = DENSS(I)
126      30 CALL VISC(NCOMP(1),ZS,TPS,NLG(1),VISC5,MUS)
127      CALL CONDC(NCOMP(1),ZS,TPS,PS,NLG(1),VISC5,FL,CONDLG,DESV,CONDEV,
128      /KS)
129      DO 31 I = 1,500
130      31 AUX(I) = VAUX(I,2)
131      IF(NLG(2).GT.1) GO TO 34
132      NC=NCOMP(2)
133      CALL BWRS
134      DO 33 I = 1,N2
135      DO 32 J = 1,11
136      32 CTEM(J) = CTE(I,J)
137      CALL DENFUG(ZT,PT,TPT,DENST(I),FL,2,NLG(2))
138      33 DENS(I) = DENST(I)
139      34 CALL VISC(NCOMP(2),ZT,TPT,NLG(2),VISCT,MUT)
140      CALL CONDC(NCOMP(2),ZT,TPT,PT,NLG(2),VISCT,FL,CONDLG,DESV,CONDEV,
141      /KT)
142      IF(OP = 2)35,41,35
143      35 IF(WT.EQ.0,0) GO TO 36
144      Q = WT*CPT*ABS(T2T - T1T)
145      WS = Q/(CPS*ABS(T1S - T2S))
146      GO TO 37
147      36 Q = WS*CPS*ABS(T2S - T1S)
148      WT = Q/(CPT*ABS(T2T - T1T))
149      37 CALL FCOR(R57,T1S,T2S,T1T,T2T,DELTAT,FT,II)
150      IF(II.GT.2) GO TO 59
151      IF(OP.EQ.3) GO TO 41
152      BWG = 16
153      DET = 0.75
154      DIT = 0.620
155      PTT = 1.0
156      APRIM = 0.302
157      ABPRIM = 0.1963
158      CPRIM = 0.25
159      LT = 16.0
160      NTPT = 1
161      38 NPASOS = II*2
162      A = Q/(U*DELTAT)
163      NTT = A/(ABPRIM*LT)
164      39 DO 40 ITUB0 = 1,17
165      NP = NPASOS/2 + 1
166      IF(NTT.GT.R(ITUB0,NP)) GO TO 40
167      IF((NTT-R(ITUB0,NP)).LT.(R(ITUB0,NP)-NTT)) ITUB = ITUB0 - 1
168      GO TO 41
169      40 CONTINUE
170      41 NTT = NTD
171      IF(OP.EQ.3) GO TO 107
172      IF(OP.EQ.2) GO TO 130
173      NTT = R(ITUB,NP)
174      107 A = ABPRIM*NTT*LT
175      U = Q/(A*DELTAT)
176      130 AT = NTT*APRIM/(144.U*NPASOS)
177      GT = WT/AT
178      RET = 3.4448239E-2*DIT*GT/MUT
179      HIO = 0.324*RET**0.8*(CPT*MUT/KT)**0.33333333*KT/DET
180      IF(OP.NE.1) GO TO 43
181      IF(HIO.GT.U) GO TO 42
182      NPASOS = NPASOS + 2

```

```

183       IF(NPASOS.GT.8) GO TO 60
184       GO TO 39
185       42 ED = SUI(ITUB)*0.2
186       M1 = 1
187       IF(ED.LT.2.0) ED = 2.0
188       43 AS = SJD*CPRIM*EU/(144.0*PTT)
189       IF(OP.NE.1) GO TO 108
190       AS = SUI(ITUB)*CPRIM*ED/(144.0*PTT)
191       IF(I1.EQ.2) AS=AS*0.5
192       108 GS=#S/AS
193       IF(NLPT.EQ.2) GO TO 44
194       DES=1.2732395*(PIT*PTT-0.78539816*DET*DET)/DET
195       GO TO 45
196       44 DES=2.5464791*(0.43*PTT*PTT-0.39269908*DET*DET)/DET
197       45 RES = 3.4448239E-2*DES*GS/MUS
198       HO=4.32*RES**0.55*(CPS*MUS/KS)**0.33333333*KS/DES
199       TW=TPT+HO/(HO+HIU)*(TPS-TPT)
200       DO 46 I=1,500
201       46 AUX(I)=VAUX(I,1)
202       IF(NLG(1).GT.1) GO TO 49
203       NC=NCOMP(1)
204       CALL B*RS
205       DO 48 I=1,N1
206       DO 47 J=1,11
207       47 CTEM(J)=CTE(I,J)
208       CALL DENFUG(ZS,PS,TW,DENSSW(I),FL,2,NLG(1))
209       48 DENS(I) = DENSSW(I)
210       49 CALL VISC(NCOMP(1),ZS,TW,NLG(1),FL,MUSW)
211       DO 50 I=1,500
212       50 AUX(I)=VAUX(I,2)
213       IF(NLG(2).GT.1) GO TO 53
214       NC=NCOMP(2)
215       CALL B*RS
216       DO 52 I=1,N2
217       DO 51 J=1,11
218       51 CTEM(J)=CTE(I,J)
219       CALL DENFUG(ZT,PT,TW,DENSTW(I),FL,2,NLG(2))
220       52 DENS(I) = DENSTW(I)
221       53 CALL VISC(NCOMP(2),ZT,TW,NLG(2),FL,MUTW)
222       PHIS=(MUS/MUSW)**0.14
223       PHIT=(MUT/MUTW)**0.14
224       HOC=HO*PHIS
225       HIOC=HIO*PHIT
226       UC=HUC*HIOC/(HOC+HIOC)
227       IF(OP.EQ.2) GO TO 54
228       RDC=(UC-U)/(UC*U)
229       IF(RDC.GE.RD) GO TO 109
230       IF(OP.NE.1) GO TO 55
231       IF(RDC/RD.LT.0.5) GO TO 54
232       ITUB=ITUH+1
233       IF(ITUB.GT.17) GO TO 61
234       GO TO 41
235       54 U=1.0/(1.0/UC+RD)
236       IF(OP.EQ.2) GO TO 7
237       GO TO 38
238       55 PRINT 116
239       109 IF(OP.EQ.3.AND.I1.NE.IPASO) PRINT 112, I1
240       NC=NCOMP(1)
241       CALL B*RS
242       CALL DENFUG(ZS,PS,TPS,RHOS,FL,0,NLG(1))
243       RHJS = RHOS*PVPS

```

```

244      NC=NCOMP(2)
245      CALL BWR5
246      CALL DENFUG(ZT,PT,TPT,RHOT,FL,0,NLG(2))
247      RHOT = RHOT*PMPT
248      SS=RHOS/62.37
249      ST=RHOT/62.37
250      FFS = EXP(-0.18752459*ALOG(RES) - 4.4335412)
251      IF(OP.NE.1) GO TO 142
252      DS=SDI(ITUB)/12.0
253      GO TO 143
142     DS = SDD
143     NCS=12.0*LT/ED
256     IF(II.EQ.2) NCS=NCS*2
257     DPS=FFS*GS*GS*DS*NCS/(5.22E10*DES*SS*PHIS)
258     IF(DPS.LT.DPPS) GO TO 56
259     IF(OP.NE.1) GO TO 63
260     ED=SDI(ITUB)
261     M1=M1+1
262     IF(M1.EQ.2) GO TO 64
263     GO TO 43
56     FFT = EXP(-0.2489455*ALOG(RET) - 5.9051599)
265     DPT=FFT*GT*GT*LT*NPASOS/(0.435E10*DIT*ST*PHIT)
266     DPR=6.907747E-7*NPASOS/RHOT*(NPASOS*WT/(APRIM*NTT))**2
267     DPTOT=DPT+DPR
268     IF(DPTOT.LE.DPPT) GO TO 70
269     IF(OP.NE.1), GO TO 65
270     ITUB=ITUB+1
271     IF(ITUB.GT.17) GO TO 66
272     GO TO 41
57     PRINT 111
274     STOP
275     59 PRINT 113,II
276     STOP
277     60 PRINT 114
278     STOP
279     61 PRINT 115
280     STOP
281     63 PRINT 117
282     GO TO 56
283     64 PRINT 118
284     STOP
285     65 PRINT 119
286     GO TO 70
287     66 PRINT 120
288     STOP
289     70 WRITE(6,85)
290     WRITE(6,90) CPS,KS,MUS,RHOS
291     WRITE(6,86)
292     WRITE(6,90) CPT,KT,MUT,RHOT
293     WRITE(6,91) DET,BWG,T1T,RET,DIT,NTPT,T2T,RES,APRIM,PTT,T1S,HOC,ABP
294     /RIM,LT,T2S,HIOC,DELTAT
295     IF(OP.EQ.2) RDC = RD
296     IF(OP.EQ.1) IPASO = II
297     IF(OP.EQ.1) DS = DS*12.0
298     WRITE(6,92) IPASO,NPASOS,DS,NTT,Q,U,UC,RDC,DPS,OPTOT
299     R1 FORMAT('1',27X,11A6,A2)
300     R2 FORMAT(51X,'DISEÑO DE UN CAMBIADOR DE CALOR',//,64X,'DATOS',//)
301     R3 FORMAT(49X,'SIMULACION DE UN CAMBIADOR DE CALOR',//,64X,'DATOS',//)
302     R4 FORMAT(48X,'COMPROBACION DE UN CAMBIADOR DE CALOR',//,64X,'DATOS',
303     //)
304     R5 FORMAT('1',//,62X,'RESULTADOS',//,58X,'LADO DE LA CORAZA',//)

```

```

305 A6 FORMAT(//,58X,'LADO DE LOS TUBOS',//)
306 A7 FORMAT('U COMPONENTE',6X,'KTRQL',4X,'F. MOL.',6X,'P. MOL.',5X,'T.
307 /EB.',4X,'T. CRIT.',4X,'P. CRIT.',6X,'V. CRIT.',2X,'Z. CRIT.',4X,'F
308 /. AC.',4X,'C. SOUDER',//,38X,'(Ld/LBMOL)',3X,'(S. P.)',5X,'(G. P.)',
309 /6X,'(PSIA)',5X,'(FT3/LBMOL)',//,(/,2X,2A6,F7.0,F12.4,F12.2,F13.2,F1
310 /1.2,F12.2,F13.2,F8.3,F11.3,F12.2))
311 A8 FORMAT(//,11X,'AG',14X,'BG',14X,'CG',14X,'DG',14X,'AL',14X,'RL',14
312 /X,'CL',14X,'DL',//,(/,4X,8(E12.5,4X)))
313 A9 FORMAT(//,22X,'AKG',15X,'BKG',15X,'CKG',15X,'AKL',15X,'RKL',15X,'C
314 /KL',//,(/,16X,6(E12.5,6X)))
315 A9 FORMAT(27X,'CP MCLA.',10X,'COND. TER. MCLA.',8X,'VISC. MCLA.',11X,
316 /'DENS. MCLA.',//,23X,4(E12.5,10X)//)
317 A91 FORMAT(////,T15,'DET='F13.2,' IN',T45,'RWG='F15.0,T68,'T1T='F
318 /12.2,' GR',T92,'RET='1PE15.5,/,T15,'DIT='0PF13.2,' IN',T45,'NTPT
319 /=',I14,T68,'T2='F12.2,' GR',T92,'RES='1PE15.5,/,T15,'APRIM='0P
320 /F11.4,' IN**2',T45,'PT='F16.2,' IN',T68,'T1S='F12.2,' GR',T92,'H
321 /OC='F15.5,' RTU/(HR-FT**2-GR)',/,T15,'ABPRIM='F10.4,' FT**2/FT',
322 /T45,'LT='F16.2,' FT',T68,'T2S='F12.2,' GR',T92,'HIOC='F14.5,' R
323 /TU/(HR-FT**2-GR)',/,T68,'DELTAT='F9.2,' GR',//)
324 A92 FORMAT(//,57X,'CAMBIADOR:',I2,'-',I2,////,47X,'DIAMETRO DE CORAZA:',
325 /,T80,F5.2,3X,'IN',//,47X,'NUMERO DE TUBOS:',T80,I3,////,47X,'CALOR T
326 /RANSFERIDO:',T80,F12.2,3X,'BTU/HR',//,47X,'COEFICIENTE TOTAL LIMPI
327 /O:',T80,F6.2,3X,'BTU/(HR-FT**2-6F)',//,47X,'COEFICIENTE TOTAL DE D
328 /ISENO:',T80,F6.2,3X,'BTU/(HR-FT**2-6F)',//,47X,'FACTOR DE OBSTRUCCI
329 /ON:',T80,F7.5,////,47X,'CAIDA DE PRESION EN LA CORAZA:',T80,F5.2,3X,
330 /'PSI',//,47X,'CAIDA DE PRESION EN LOS TUBOS:',T80,F5.2,3X,'PSI')
331 A93 FORMAT( )
332 A94 FORMAT(6I2,11A6,A2)
333 A95 FORMAT(2A6,3F7.0,4F6.0,T70,F6.1,/,8F10.0,/,6F10.0)
334 A111 FORMAT(39X,'S MAYOR DE 1.0,EL CAMBIADOR NO SE PUEDE CALCULAR POR T
335 /EMPERATURAS')
336 A112 FORMAT(42X,'EL NUMERO DE PASOS EN LA CORAZA NO CHECA, II ='I3)
337 A113 FORMAT(38X,'SE REQUIEREN MAS PASOS EN LA CORAZA, EN EL DISENO, II
338 /='I3)
339 A114 FORMAT(23X,'EL NUMERO DE PASOS EN LOS TUBOS ESTA EXCEDIDO DEBIDO A
340 /L COEFICIENTE DE PELICULA INTERNO')
341 A115 FORMAT(30X,'EL NUMERO DE TUBOS ESTA EXCEDIDO POR FACTOR DE OBSTRU
342 /CION, EN EL DISENO')
343 A116 FORMAT(25X,'EL CAMBIADOR NO SIRVE PARA EL SERVICIO POR FACTOR DE O
344 /BSTRUCCION, EN LA SIMULACION')
345 A117 FORMAT(28X,'LA CAIDA DE PRESION EN LA CORAZA ES MAYOR QUE LA PERMI
346 /SIBLE, EN LA SIMULACION')
347 A118 FORMAT(29X,'MI = 2, SE NECESITA MAYOR ESPACIADO DE DEFLECTORES, EN
348 / EL DISENO')
349 A119 FORMAT(28X,'LA CAIDA DE PRESION EN LOS TUBOS ES MAYOR QUE LA PERMI
350 /SIBLE, EN LA SIMULACION')
351 A120 FORMAT(38X,'EL NUMERO DE TUBOS ESTA EXCEDIDO POR CAIDA DE PRESION,
352 / EN EL DISENO')
353 A121 FORMAT(//,58X,'LADO DE LA CORAZA',//)
354 STOP
355 END

```

ES*RIJULG(1).FCOR

```

1  SUBROUTINE FCOR(*,TS1,TS2,TT1,TT2,LMTD,FT,II)
2  REAL LMTD
3  IF(TT1.GT.TS1) GO TO 10
4  R = (TS1-TS2)/(TT2-TT1)
5  S = (TT2-TT1)/(TS1-TT1)
6  LMTD = ((TS1-TT2)-(TS2-TT1))/ALOG((TS1-TT2)/(TS2-TT1))
7  GO TO 201
8
9  10 R = (TT1-TT2)/(TS2-TS1)
10 S = (TS2-TS1)/(TT1-TS1)
11 LMTD = ((TT1-TS2)-(TT2-TS1))/ALOG((TT1-TS2)/(TT2-TS1))
12 201 FG = (1-S)/(1-R*S)
13 IF(FG.LE.0.0) RETURN 1
14 20 F1 = SQRT(R*R+1)*ALOG(FG)
15 F2 = 2-S*(R+1-SQRT(R*R+1))
16 F3 = 2-S*(R+1+SQRT(R*R+1))
17 IF(F2.LE.0.0.OR.F3.LE.0.0) GO TO 50
18 FT = F1/((R-1)*ALOG(F2/F3))
19 II = 1
20 IF(FT.GT.0.75) GO TO 40
21 50 H1 = SQRT(R*R+1)/(2*(R-1))*ALOG(FG)
22 H2 = 2/S-1-R+(2/S)*SQRT((1-S)*(1-R*S))+SQRT(R*R+1)
23 H3 = 2/S-1-R+(2/S)*SQRT((1-S)*(1-R*S))-SQRT(R*R+1)
24 IF(H2.LE.0.0.OR.H3.LE.0.0) GO TO 60
25 FT = H1/ALOG(H2/H3)
26 II = 2
27 GO TO 70
28 60 FT = 0.0
29 70 IF(FT.LT.0.85) RETURN 1
30 40 LMTD = LMTD*FT
31 RETURN
    END

```

EJEMPLO DE SIMULACION
SIMULACION DE UN CAMBIADOR DE CALOR

DATOS

LADO DE LA CORAZA

COMPONENTE	KTROL	F. MOL.	P. MOL. (LB/LBMOL)	T. EB. (G. R.)	T. CRIT. (G.R.)	P. CRIT. (PSIA)	V. CRIT. (FT3/LBMOL)	Z. CRIT.	F. AC.	C. SOUDER
FRACCION 1	1.	1.0000	270.33	1089.00	1372.00	179.00	17.83	.211	.764	885.70
AG		BG	CG	DG		AL	BL		CL	DL
.00000		.00000	.00000	.00000		.33016+00	.64032-03		.00000	.00000
		AKG	BKG	CKG		AKL	BKL		CKL	
		.00000	.00000	.00000		.40556-03	-.33690-06		.00000	

LADO DE LOS TUBOS

COMPONENTE	KTROL	F. MOL.	P. MOL. (LB/LBMOL)	T. EB. (G. R.)	T. CRIT. (G.R.)	P. CRIT. (PSIA)	V. CRIT. (FT3/LBMOL)	Z. CRIT.	F. AC.	C. SOUDER
FRACCION 2	1.	1.0000	277.41	1100.00	1385.00	167.00	18.64	.209	.733	888.80
AG		BG	CG	DG		AL	BL		CL	DL
.00000		.00000	.00000	.00000		.16485+00	.97500-03		.00000	.00000
		AKG	BKG	CKG		AKL	BKL		CKL	
		.00000	.00000	.00000		.10173-01	-.15820-04		.00000	

6 7 8 9

RESULTADOS

LADO DE LA CORAZA

CP MCLA.
.63676+00

COND. TER. MCLA.
.62448-01

VISC. MCLA.
.23954+00

DENS. MCLA.
.43161+02

LADO DE LOS TUBOS

CP MCLA.
.74613+00

COND. TER. MCLA.
.46325-01

VISC. MCLA.
.10758+00

DENS. MCLA.
.38650+02

DET= 1.00 IN
DIT= .83 IN
APRIM= .5460 IN**2
ABPRIM= .2618 FT**2/FT

BWG= 14.
NTPT= 1
PT= 1.25 IN
LT= 16.00 FT

T1T= 1135.67 GR
T2T= 1010.62 GR
T1S= 786.67 GR
T2S= 937.10 GR
DELTAT= 195.19 GR

PET= 1.97645+05
RES= 6.91884+04
HOC= 177.24776 BTU/(HR-FT**2-GR)
HIOC= 303.79846 BTU/(HR-FT**2-GR)

464

CAMBIADOR: 1- 4

DIAMETRO DE CORAZA: 25.00 IN
NUMERO DE TUBOS: 220
CALOR TRANSFERIDO: 14119443.37 BTU/HR
COEFICIENTE TOTAL LIMPIO: 77.32 BTU/(HR-FT**2-GF)
COEFICIENTE TOTAL DE DISENO: 111.94 BTU/(HR-FT**2-GF)
FACTOR DE OBSTRUCCION: .00400
CAIDA DE PRESION EN LA CORAZA: 4.56 PSI
CAIDA DE PRESION EN LOS TUBOS: 4.01 PSI

EJEMPLO DE DISEÑO
DISEÑO DE UN CAMBIADOR DE CALOR

DATOS

LADO DE LA CORAZA

COMPONENTE	KTROL	F. MOL.	P. MOL. (LB/LBMOL)	T. EB. (G. R.)	T. CRIT. (G.R.)	P. CRIT. (PSIA)	V. CRIT. (FT3/LBMOL)	Z. CRIT.	F. AC.	C. SOURCE
FRACCION 1	1.	1.0000	270.33	1089.00	1372.00	179.00	17.83	.211	.764	885.70
AG	BG	CG	DG	AL	PL	CL	FL			
.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.33016+00	.64032-03	.00000	.00000	.00000	.00000
	AKG	BKG	CKG	AKL	BKL	CKL				
	.00000	.00000	.00000	.00000	.40556-03	-.33690-06	.00000	.00000	.00000	.00000

LADO DE LOS TUBOS

COMPONENTE	KTROL	F. MOL.	P. MOL. (LB/LBMOL)	T. EB. (G. P.)	T. CRIT. (G.R.)	P. CRIT. (PSIA)	V. CRIT. (FT3/LBMOL)	Z. CRIT.	F. AC.	C. SOURCE
FRACCION 2	1.	1.0000	277.41	1100.00	1385.00	167.00	18.64	.209	.733	888.00
AG	BG	CG	DG	AL	PL	CL	FL			
.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.16485+00	.97500-03	.00000	.00000	.00000	.00000
	AKG	BKG	CKG	AKL	BKL	CKL				
	.00000	.00000	.00000	.00000	.10173-01	-.15820-04	.00000	.00000	.00000	.00000

RESULTADOS
LADO DE LA CORAZA

CP MCLA.
.63676+00

COND. TER. MCLA.
.59045-01

VISC. MCLA.
.19995+00

DENS. MCLA.
.43161+02

LADO DE LOS TUBOS

CP MCLA.
.74613+00

COND. TER. MCLA.
.17917+00

VISC. MCLA.
.13238+00

DENS. MCLA.
.38650+02

ULT=	.75 IN	BWG=	16.	T1T=	1135.67 GR	RET=	1.07932+05
UIT=	.62 IN	NTPT=	1	T2T=	1010.62 GR	RES=	1.90740+05
APRIM=	.3020 IN**2	PT=	1.00 IN	T1S=	786.67 GR	HOC=	289.75289 BTU/(HR-FT**2-GR)
ABPKIM=	.1963 FT**2/FT	LT=	16.00 FT	T2S=	937.11 GR	HIOC=	668.23869 BTU/(HR-FT**2-GR)
				DELTAT=	195.18 GR		

40

CAMBIADOR: 1- 2

DIAMETRO DE CORAZA:	19.25	IN
NÚMERO DE TUBOS:	220	
CALOR TRANSFERIDO:	14399861.75	BTU/HR
COEFICIENTE TOTAL LIMPIO:	106.77	BTU/(HR-FT**2-GF)
COEFICIENTE TOTAL DE DISEÑO:	202.11	BTU/(HR-FT**2-GF)
FACTOR DE OBSTRUCCION:	.00442	
CAIDA DE PRESION EN LA CORAZA:	3.66	PSI
CAIDA DE PRESION EN LOS TUBOS:	2.09	PSI

CAPITULO XV

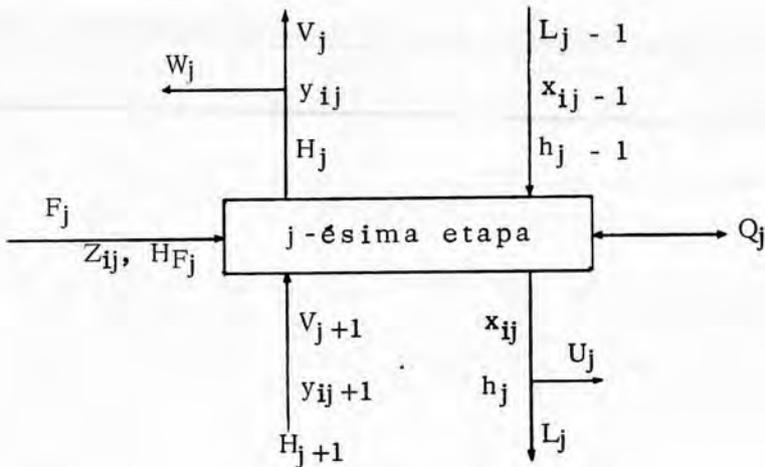
M A T R I X

Los cálculos involucrados con la separación de mezclas multicomponentes tienen gran importancia y el determinar los perfiles de temperatura, de vapor y de composición en una columna de separación de etapas es un problema que se encuentra de manera frecuente. Asimismo, es necesario muchas veces poder determinar estos perfiles en una columna en la cual se tengan varias corrientes de entrada y de salida; uno de los métodos más empleados para llevar a cabo este tipo de cálculos es el conocido como el "Método de la Matriz Tridiagonal". En este capítulo se presenta este método y un programa de computadora capaz de resolverlo.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA.

Supóngase una columna con n etapas de equilibrio, incluyendo un condensador (el cual puede ser parcial o total) y un rehervidor. Estas etapas se numeran del domo al fondo de la columna con el condensador siendo el primero y el rehervidor siendo el n -ésimo. Supóngase también que en todas las etapas, exceptuando el condensador y el rehervidor, se tiene una alimentación (F_j), una extracción de vapor (W_j) y una extracción de líquido (U_j), así como un cambiador de calor en el cual se transfiere una cantidad de calor (Q_j). Por último, supóngase que cada etapa de equilibrio es ideal (el vapor (V_j) que sale de la etapa está en equilibrio con el líquido (L_j) que también sale de la misma).

Con el fin de poder plantear las ecuaciones para una etapa, considérese el esquema siguiente :



donde :

y_i : Es la fracción mol del componente i en el vapor, y

x_i : Es la fracción mol del componente i en el líquido.

Haciendo un balance de materia en esta etapa, se tiene :

$$\begin{aligned} L_{j-1} \cdot x_{ij-1} + V_{j+1} \cdot y_{ij+1} + F_j \cdot Z_{ij} &= \\ = (W_j + V_j) \cdot y_{ij} + (U_j + L_j) \cdot x_{ij} & \quad 1) \end{aligned}$$

Si k_{ij} es la constante de equilibrio para el componente i en la etapa se tiene :

$$y_{ij} = k_{ij} \cdot x_{ij} \quad 2)$$

$$\sum_{i=1}^m y_{ij} = 1.0 \quad 3)$$

$$\sum_{i=1}^m x_{ij} = 1.0 \quad 4)$$

Haciendo un balance de energía en la etapa, se tiene :

$$\begin{aligned} L_{j-1} \cdot h_{j-1} + H_{j+1} \cdot V_{j+1} + F_j \cdot H_{Fj} &= \\ = H_j \cdot (W_j + V_j) + h_j \cdot (U_j + L_j) + Q_j & \end{aligned} \quad 5)$$

Si se combinan las ecuaciones 1) y 2), si se hace un balance de materia global desde el condensador hasta la j -ésima etapa y si se expresan las L en función de las V , se tiene :

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{k=2}^j (F_k - W_k - U_k) - D \quad 6)$$

$$\text{con } 2 \leq j \leq n - 1$$

donde :

$$D = V_1 + U_1 \quad 7)$$

V_1 y U_1 son el vapor y el líquido extraídos del condensador.

Definiendo las variables :

$$A_j = V_j + \sum_{k=2}^{j-1} (F_k - W_k - U_k) - D \quad 8)$$

$$\text{con } 2 \leq j \leq n - 1$$

$$A_n = V_n + B$$

donde :

B : Es el líquido que se extrae del fondo de la columna.

$$B_1 = -(V_1 \cdot k_{11} + U_1 + L_1) \quad 10)$$

donde :

L_1 : Es el reflujo del condensador (entrada de líquido a la segunda etapa).

$$B_j = - \left[(V_j + W_j) \cdot k_{ij} + V_{j+1} + \sum_{k=2}^j (F_k - W_k - U_k) - D + U_j \right] \quad 11)$$

$$\text{con } 2 \leq j \leq n - 1$$

$$B_n = -(V_n \cdot k_{in} + B) \quad 12)$$

$$C_1 = V_2 \cdot k_{12} \quad 13)$$

$$C_j = V_{j+1} \cdot k_{ij+1} \quad \text{con } 2 \leq j \leq n - 1 \quad 14)$$

$$D_1 = 0 \quad 15)$$

$$D_j = -F_j \cdot Z_{ij} \quad 16)$$

$$D_n = 0 \quad 17)$$

Se pueden plantear balances de materia para el componente i en toda la columna de la manera siguiente :

$$B_1 x_{i1} + C_1 \cdot x_{i2} = 0.0 \quad 18)$$

$$A_j \cdot x_{i,j-1} + B_j \cdot x_{ij} + C_j x_{i,j+1} = D_j \quad 19)$$

$$\text{con } 2 \leq j \leq n - 1$$

$$A_n x_{i,n-1} + B_n x_{in} = D_n \quad 20)$$

Representando estas tres últimas ecuaciones en forma matricial, se tiene :

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & & \\ & A_j & B_j & C_j & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ & & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} & \\ & & & A_n & B_n & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{ij} \\ \dots \\ x_{i, n-1} \\ x_{in} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_j \\ \dots \\ D_{n-1} \\ D_n \end{bmatrix} \quad (21)$$

Esta última expresión constituye la matriz tridiagonal para el componente i ; se puede plantear una expresión similar para cada uno de los componentes que se tengan en la columna.

Asimismo, es posible plantear la ecuación (para todas las etapas):

$$\sum_{i=1}^m k_{ij} \cdot x_{ij} = 1.0 \quad (22)$$

donde :

m : Es el número de componentes en la columna.

y la ecuación :

$$\begin{aligned} & (H_{j+1} - h_j) \cdot V_{j+1} - (H_j - h_j) \cdot (V_j + W_j) - \\ & - (h_j - h_{j-1}) \cdot L_{j-1} + F_j \cdot (H_{Fj} - h_j) - Q = 0 \end{aligned} \quad (23)$$

con $1 \leq j \leq n$

METODO DE SOLUCION.

Hasta ahora se han presentado las ecuaciones necesarias para poder calcular los perfiles de vapor, de temperatura y de composición en una columna; enseguida se plantean los métodos para resolverlas.

Como se puede observar en las ecuaciones 8) a la 14), los perfiles de composición no se pueden establecer si no se conocen primero las cantidades de vapor y las constantes de equilibrio líquido-vapor de todos los componentes, en todas las etapas. Las constantes de equilibrio líquido-vapor son función de la temperatura y por lo tanto, es necesario establecer primero el valor de ésta en todas las etapas de la columna. La temperatura y la cantidad de vapor son dos de las incógnitas que se quieren determinar y es entonces necesario proceder mediante un método iterativo (1) para poder hacer el cálculo :

- Se suponen perfiles iniciales de temperatura y de vapor en la columna.
- Se calculan las constantes de equilibrio para todos los componentes, en todas las etapas con un método que las exprese únicamente como funciones de la temperatura.
- Se calculan las composiciones, resolviendo la ecuación 21) para cada uno de los componentes presentes en la columna.
- Se calculan nuevos valores de temperatura resolviendo la ecuación

ción 22).

- Se calculan las entalpías de vapor y de líquido con un método que las exprese también únicamente como funciones de la temperatura.
- Se calculan nuevos valores de vapor, resolviendo la ecuación 23).
- Se repiten los pasos anteriores, del segundo al último, hasta que la diferencia entre los últimos valores de temperatura obtenidos y los anteriores cumpla un criterio de convergencia determinado.

Se analizarán ahora todos los pasos de la secuencia de cálculo que se acaba de establecer con los métodos que se pueden emplear para llevarlos a cabo :

El perfil inicial de temperaturas se puede establecer como un perfil lineal, dando una temperatura para el domo de la columna y una temperatura para el fondo, haciendo la diferencia entre estos dos valores, dividiendo ésta última entre el número de etapas menos una y sumando cada vez este resultado a la temperatura del domo.

Debido a que la mayoría de las veces, las temperaturas del domo y del fondo no se conocen, se propone que se fijen valores arbitrarios aproximados, que se haga el cálculo de las constantes de equilibrio líquido-vapor y de las composiciones con la ecuación 21), como se

describe enseguida, pero que antes de proceder con el cálculo del nuevo perfil de temperaturas se calculen nuevas temperaturas del domo y del fondo con el mismo método que también se propone adelante y que se vuelva a comenzar; de esta manera se puede comenzar con un perfil de temperaturas lineal más aproximado al real y los riesgos de tralapes de las temperaturas de una etapa a otra se reducen al mínimo.

El perfil inicial del vapor se puede obtener haciendo un balance de materia en el condensador, conociendo la cantidad de productos y la recirculación para obtener el vapor V_2 que sale de la segunda etapa y manteniendo este valor constante para los demás, hasta llegar a alguna en la cual se alimente o se extraiga vapor : si se alimenta en la etapa n , se debe restar la cantidad alimentada y conservar este nuevo valor para las demás etapas, a partir de la $(n+1)$ -ésima; por el contrario, si se extrae en la etapa m se debe sumar la cantidad extraída y mantener el valor para las restantes a partir de la $(m+1)$ -ésima.

Teniendo la temperatura en todas las etapas, se pueden determinar las constantes de equilibrio líquido-vapor para todos los componentes. El método propuesto para estos cálculos es el de Hougen (2) basado en la temperatura y presión reducidas. Si se considera la presión como constante en la columna, la única variable que queda es la temperatura. El cálculo de las constantes de equilibrio líquido-vapor se hace mediante correlaciones obtenidas de la tabla de Hougen (2) con el programa AJUSTE, que se presenta en el Capítulo XXII, en la tercera Sec

ción; las correlaciones se hicieron tomando como variable dependiente los logaritmos naturales de los valores de la tabla, previamente multiplicados por mil y como variable independiente los logaritmos naturales de las presiones reducidas, también previamente multiplicados por mil, guardando constantes los valores de la temperatura reducida.

De esta manera se obtuvieron veinticinco ecuaciones del cuarto orden; si la temperatura reducida se encuentra entre dos de los valores de la tabla, se procede mediante una interpolación lineal entre los resultados obtenidos de las correlaciones correspondientes a estos dos valores.

Las constantes de equilibrio líquido - vapor se calculan, finalmente, evaluando la exponencial del valor obtenido de la correlación o de la interpolación y multiplicando este resultado por mil. Los coeficientes de las veinticinco ecuaciones, de las cuales se habló arriba, aparecen en las proposiciones DATA de la subrutina EQUIL 2, que se describe más adelante y cuyo listado aparece al final del capítulo.

El cálculo de las composiciones se lleva a cabo resolviendo la ecuación 21) para cada uno de los componentes presentes en la columna, como se dijo anteriormente. La ecuación 21) se puede resolver con un método de inversión de matrices, o bien, mediante un algoritmo derivado del método de eliminación de Gauss.

Definiendo las variables :

$$P_1 = C_1 / B_1$$

$$q_1 = D_1 / B_1$$

$$P_j = C_j / (B_j - A_j P_{j-1}) \quad \text{con } 2 \leq j \leq n-1$$

$$q_j = (D_j - A_j q_{j-1}) / (B_j - A_j P_{j-1}) \quad \text{con } 2 \leq j \leq n$$

Los valores de x_{ij} se pueden calcular evaluando primero x_{in} y retrocediendo hasta llegar a x_{i1} :

$$x_{in} = q_n$$

$$x_{ij} = q_j - P_j x_{i, j+1}$$

Teniéndose estos valores de la composición y conociendo también las constantes de equilibrio líquido-vapor, se obtienen los nuevos valores de temperatura en todas las etapas, resolviendo la ecuación 22) en cada una de ellas. La solución de esta ecuación requiere de un método de aproximación, ya que las constantes de equilibrio líquido-vapor dependen de la temperatura, como se dijo anteriormente; este método se puede describir de la siguiente manera :

- Se supone una nueva temperatura.
- Se calculan las constantes de equilibrio líquido-vapor a la temperatura supuesta.
- Se calcula la sumatoria de la ecuación 22).

- Si el resultado de la sumatoria es igual a 1, el valor supuesto de la temperatura es el correcto, si no, se vuelve al primer-paso.

Para poder llevar a cabo este método iterativo, es necesario disponer de un método de solución que de un valor más aproximado de la temperatura en cada iteración. Para este efecto, se empleó el método de Muller, el cual se describe en el Capítulo XXIII en la tercera Sección. Este método requiere de tres valores iniciales para hacer el cálculo y en este problema se proponen la temperatura que se tiene en la etapa así como esta misma temperatura más y menos la diferencia de temperaturas entre dos etapas consecutivas, al haberse establecido el perfil inicial.

Se propone un valor de una décima de grado como tolerancia en la solución de la ecuación 22).

Debido a que las fracciones mol se calculan con la ecuación 21), no necesariamente suman uno al estar dentro del proceso iterativo total y por lo tanto, la ecuación 22) puede arrojar resultados que no sean correctos en algunas de las iteraciones y este hecho provoca que el proceso sea más largo y que incluso pueda fallar, por lo que es recomendable normalizar las fracciones mol antes de entrar al cálculo del nuevo perfil de temperaturas que se acaba de describir.

Las entalpías del líquido y del vapor expresadas como función de la

temperatura son solamente entalpías ideales y se pueden evaluar con el método descrito en el Capítulo IV, en la primera Sección.

Finalmente, el nuevo perfil de vapor se establece con la ecuación 23) como se dijo anteriormente. La ecuación 23) está en función de los términos de vapor; despejando el valor de la etapa j , se tiene :

$$\begin{aligned}
 V_j &= ((V_{j-1} + W_{j-1}) \cdot (H_{j-1} - h_{j-1}) + \\
 &+ (h_{j-1} - h_{j-2}) \cdot (V_{j-1} + \sum_{k=2}^{j-2} (F_k - W_k - U_k) - D) \\
 &- F_{j-1} \cdot (H_{F_{j-1}} - h_{j-1}) + Q) / (H_j - h_{j-1}) \quad 24)
 \end{aligned}$$

$$\text{con } 3 \leq j \leq n$$

Como se dijo anteriormente, todos los pasos que se acaban de describir se repiten hasta que la diferencia entre los últimos valores de temperatura y los de la iteración anterior cumpla con un cierto criterio de convergencia; el cálculo del nuevo perfil de vapor depende del nuevo perfil de temperatura y queda fijo una vez que éste último lo está.

El criterio de convergencia está dado por :

$$\sum_{j=1}^n ((T_j)_k - (T_j)_{k-1})^2 \leq \epsilon \quad 25)$$

donde :

ϵ : Es una cierta tolerancia, y

k : Es el número de la iteración.

Se propone un valor igual a la centésima parte del número de etapas para la tolerancia.

El método de la Matriz Tridiagonal para poder establecer los perfiles de temperaturas, de vapor y de composición, empleando los diferentes métodos de solución y criterios de convergencia que se describieron anteriormente, es estable y da buenos resultados.

DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA.

El programa MATRIX es capaz de calcular los perfiles de temperatura, de vapor y de composición en columnas de etapas; puede hacer el cálculo para columnas hasta de 50 etapas con 20 componentes y permite que cada una de aquéllas tenga una alimentación y una extracción, así como un intercambio de calor con alguna corriente exterior.

El programa sigue la secuencia establecida en el método de solución, calculando primero un perfil inicial lineal de temperaturas con los valores de ésta que se le hayan dado para el domo y para el fondo; después de este paso, calcula el perfil inicial de vapor, las constantes de equilibrio líquido-vapor, los coeficientes de las matrices tridiagonales para todos los componentes, resuelve estas matrices y vuelve a comenzar calculando, él mismo, nuevas temperaturas para el domo y el fondo; tiene un contador del número de iteraciones totales y este último paso que se acaba de describir lo lleva a cabo si el contador tiene un valor de cero; finalmente calcula el nuevo perfil de temperatura, las entalpías de líquido y de vapor en todos los platos y el nuevo perfil de vapor.

El criterio de convergencia es el mismo que se propuso en el método de solución; de no cumplirse este criterio, vuelve a comenzar desde el cálculo de los coeficientes B y C de las matrices tridiagonales (los coeficientes A no dependen de las constantes de equilibrio líquido-

vapor).

MATRIX requiere de los siguientes subprogramas para hacer el cálculo:

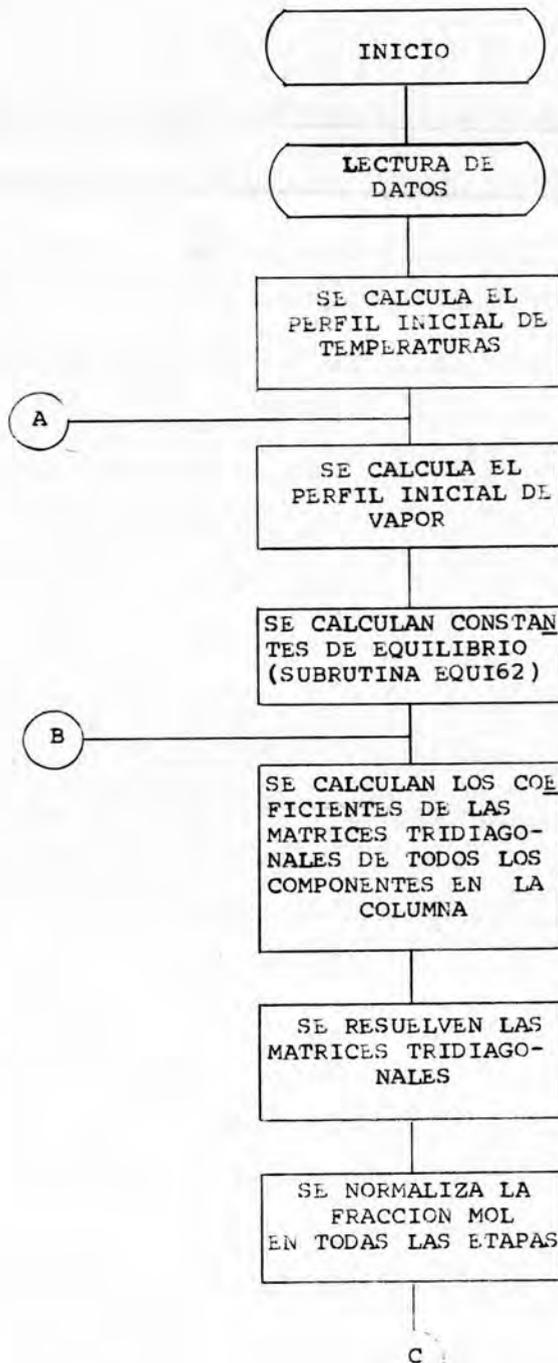
EQUIL 2 : Calcula las constantes de equilibrio en función de la temperatura, según el método de Hougen, interpolando si es necesario.

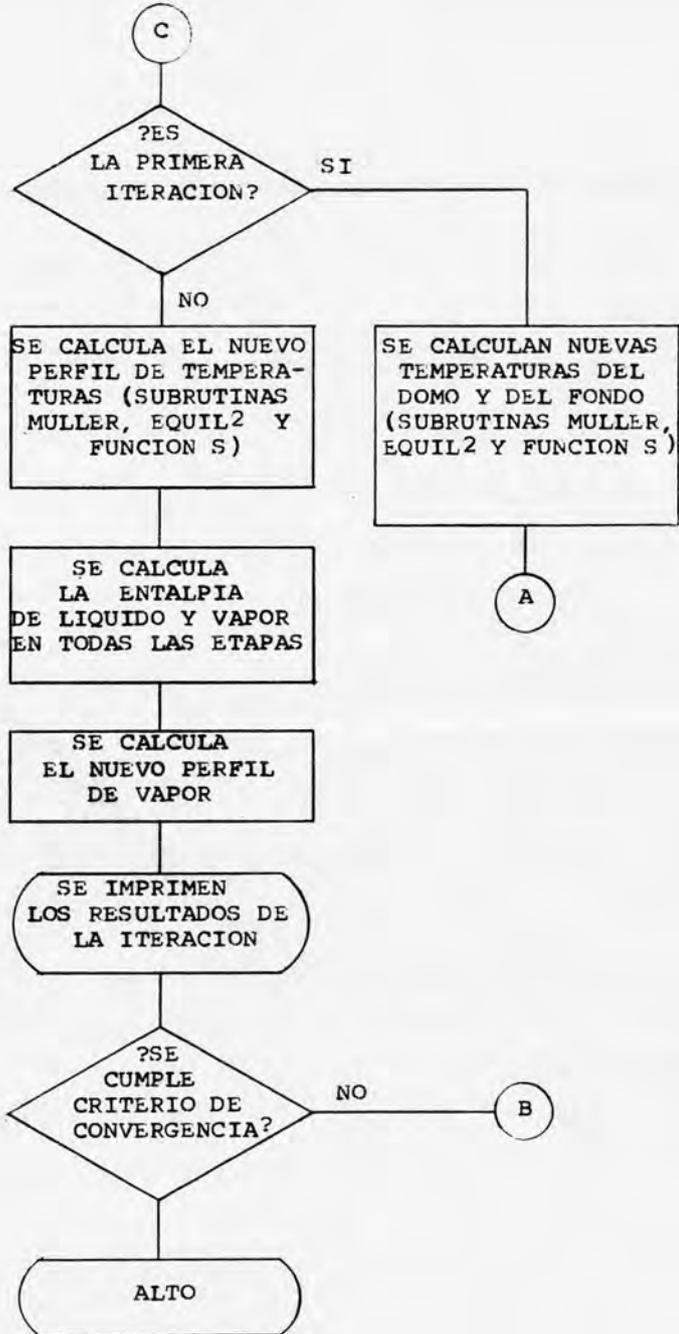
MULLER : Calcula los valores de temperatura para establecer el nuevo perfil (esta subrutina se describe en el capítulo XXIII en la tercera sección).

S : Subprograma de función que calcula el valor de la sumatoria de las constantes de equilibrio líquido-vapor, multiplicadas por sus fracciones mol respectivas en la fase líquida (ecuación 22).

ENTALP : Calcula las entalpías ideales para las fases líquida y vapor (esta subrutina se describe en el capítulo IV, en la primera sección).

El programa organiza estos subprogramas de manera de poder obtener de ellos todos los resultados que le sean necesarios para cada una de las etapas y así poder hacer los cálculos para la columna.

PROGRAMA MATRIX
DIAGRAMA DE BLOQUES



ENTRADA DE DATOS.

Los datos que requiere el programa MATRIX y la manera de dárse los son :

En la primera tarjeta :

NPLAT : Número de etapas de la columna, con una especificación I 2.

NCOMP : Número de componentes presentes en la columna, con una especificación I 2.

TITULO : Título del problema, con una especificación de (12 A 6, A 4).

En la segunda tarjeta :

COMPTE : Vector de los nombres de los componentes presentes; esos nombres se deben alimentar abreviados a cuatro caracteres; cada uno de ellos se lee con una especificación A 4; la especificación total es de 20 A 4.

En la tercera tarjeta :

COMP (I) : Nombre del componente i con una especificación de 2 A 6.

PM (I) : Peso molecular del componente i con una especificación F 7.2.

TB (I) : Temperatura de ebullición normal del componente i, en °R, con una especificación de F 6.0.

- TC (I) : Temperatura crítica del componente *i*, en °R, con una especificación de F 6.0.
- PC (I) : Presión crítica del componente *i*, en PSIA, con una especificación de F 6.0.
- VC (I) : Volumen crítico del componente *i*, en ft³/lb mol, con una especificación de F 5.0.
- ZC (I) : Factor de compresibilidad crítico del componente *i*, con una especificación de F 5.0.
- W (I) : Factor acéntrico del componente *i*, con una especificación de F 5.0.

Después del campo para el factor acéntrico, se deben dejar catorce espacios en blanco.

- CF (I) : Calor de formación del componente *i*, en kcal/g-mol, con una especificación de F 8.0.
- HV 25 (I) : Calor latente de vaporización del componente *i*, en cal/g, con una especificación de F 6.2.

En la cuarta tarjeta :

AG(I) BG(I) : Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica y de CG(I) DG(I) la entalpía ideal del componente *i*; las cuatro primeras corresponden a la fase gaseosa y las cuatro últimas a la fase líquida, todas con una especificación de F 10.0; la especificación total es 8 F 10.0.

Es necesario tener una pareja de tarjetas 3 y 4 para cada uno de los

componentes presentes en la columna.

En la quinta tarjeta (en formato libre) :

- V 1 : Cantidad de vapor que se obtiene como producto de la primera etapa (o condensador), en lb mol.
- U 1 : Cantidad de líquido que se obtiene como producto de la primera etapa (o condensador), en lb mol.
- B 1 : Cantidad de producto que se obtiene de la última etapa, en lb mol.
- L 1 : Cantidad que se recircula del condensador a la segunda etapa, en lb mol.
- TD : Temperatura supuesta en el domo, en °R.
- TF : Temperatura supuesta en el fondo, en °R.
- P 1 : Presión en la torre, en PSIA.

En la sexta tarjeta (en formato libre) :

- NPAT : Número de etapas en las que se tiene una alimentación.
- NPAV : Número de etapas en las que se tiene una alimentación de vapor.
- NPEV : Número de etapas en las que se tiene una extracción de vapor.
- NPEL : Número de etapas en las que se tiene una extracción de líquido.
- NPEQ : Número de etapas en las que se intercambia calor con una corriente exterior.

En la séptima tarjeta (en formato libre) :

NOPAT (I), : Número de la etapa en la que se alimenta y la cantidad

VAT (I) que se alimenta, en lb mol; se dan los valores por parejas hasta completar NPAT.

NOPAV (I), : Número de la etapa en la que se alimenta vapor y la cantidad

VAV (I) que se alimenta, en lb mol; se dan los valores por parejas hasta completar NPAV.

NOPEV (I), : Lo mismo que las variables anteriores para las etapas en

VEC (I) las que se extrae vapor; se deben completar los valores hasta NPEV.

NOPEL (I), : Lo mismo que NOPAV (I), VAV (I) para las etapas en las

VEL (I) que se extrae líquido; se debe completar hasta NPEL.

NOPEQ (I), : Lo mismo que NOPAV (I), VAV (I) para las etapas en las

VEQ (I) que se transfiere calor; se debe completar hasta NPEQ.

En la octava tarjeta (en formato libre) :

Los valores en esta tarjeta se dan en el orden que se describe a continuación, para todas las etapas en las que se alimente :

XF : Fracciones mol de todos los componentes presentes en la columna (si algún componente no está presente en la alimentación se debe dar un valor de cero).

NLG : Fase de la corriente alimentada :

1 : Líquido.

2 : Gas.

- T 1 : Temperatura de la corriente alimentada, en °R.
- HA : Entalpia de la corriente alimentada, en BTU/lb mol.

R E S U L T A D O S.

El programa MATRIX hará una tabla de los resultados obtenidos después de cada iteración; esta tabla consiste en :

- El título dado al problema.
- El número de la iteración.
- Los números de las etapas en orden creciente.
- La temperatura en cada una de las etapas, en °R.
- El vapor en cada una de las etapas, en lb mol.
- Las fracciones mol de todos los componentes en cada una de las etapas

En la parte superior de la tabla, después del número de la iteración, arriba de su fracción mol respectiva, aparecerán los nombres abreviados a cuatro caracteres que se hayan dado a los componentes.

En el caso de ser más de seis componentes, estos nombres continuarán en el renglón siguiente así como su fracción mol respectiva en cada etapa.

NOMENCLATURA DEL PROGRAMA
MATRIX

- A : Matriz que guarda los coeficientes A de las matrices tri diagonales de todos los componentes presentes en la co lumna.
- AG, BG : Coeficientes para el cálculo de la entalpía ideal, para la
CG, DG fase gaseosa.
- AL, BL : Coeficientes para el cálculo de la entalpía ideal, para la
CL, DL fase líquida.
- B : Matriz que guarda los coeficientes B de las matrices tri diagonales de todos los componentes presentes en la co lumna.
- B1 : Producto obtenido en el fondo de la columna, en lb mol.
- C : Matriz que guarda los coeficientes C de las matrices tri diagonales de todos los componentes presentes en la co lumna.
- CE : Matriz que guarda las constantes de equilibrio líquido-va por de todos los componentes presentes en la columna, en todas las etapas de la misma.
- CF : Vector que guarda los calores de formación de todos los componentes presentes en la columna, en kcal/g mol.
- COMP : Matriz que guarda los nombres de los componentes presentes en la columna

- COMPTE : Vector que guarda los nombres abreviados (a cuatro caracteres por nombre) de todos los componentes presentes en la columna; se emplea únicamente para impresión.
- D : Matriz que guarda los coeficientes D de las matrices tri diagonales de todos los componentes presentes en la columna.
- DTPP : Diferencia de temperaturas entre dos etapas sucesivas, en °R.
- D1 : Producto total obtenido del condensador (1a. etapa) de la columna, en lb mol.
- H : Vector que guarda las entalpías de los componentes puros, en BTU/lb mol (no se emplea en el programa pero es necesario en las llamadas a la subrutina ENTALP).
- HA : Vector que guarda las entalpías ideales de las corrientes de alimentación a la columna, en BTU/lb mol.
- HL : Vector que guarda las entalpías del líquido de todas las etapas de la columna, en BTU/lb mol.
- HV : Vector que guarda las entalpías del vapor de todas las etapas de la columna, en BTU/lb mol.
- HV 25 : Vector que guarda los calores latentes de vaporización a 25°C de todos los componentes presentes en la columna, en cal/g.
- H1 : Entalpía del vapor, obtenido de la subrutina ENTALP, en BTU/lb mol.

- H2 : Entalpia del líquido, obtenido de la subrutina ENTALP, en BTU/lb mol.
- ITER : Contador del número de iteraciones globales.
- L1 : Recirculación del condensador (1a. etapa); alimentación del líquido a la segunda etapa, en lb mol.
- NCOMP : Número de componentes presentes en la columna.
- NLG : Vector que guarda el valor de la fase de todas las corrientes de alimentación a la columna :
- 1 : Líquido.
- 2 : Vapor.
- NPAT : Número de corrientes de alimentación.
- NPAT1 : Variable auxiliar para la lectura de los números de las etapas de alimentación y de los gastos de estas corrientes de alimentación.
- NPAV : Número de corrientes de alimentación de vapor.
- NPAV1 : Lo mismo que NPAT1 para las alimentaciones de vapor.
- NPEL : Número de corrientes de extracción de líquido.
- NPEL1 : Lo mismo que NPAT1 para las extracciones de líquido.
- NPEQ1 : Lo mismo que NPAT1 para las etapas en las que se transfiere calor con alguna corriente exterior.
- NPEV : Número de etapas en las que se extrae vapor.
- NPEV1 : Lo mismo que NPAT1 para las corrientes en las que se extrae vapor.
- NPLAT : Número de etapas de la columna.

- NOPAT : Vector que guarda los números de las etapas en las que se alimenta.
- NOPAV : Vector que guarda los números de las etapas en las que se alimenta vapor.
- NOPEL : Vector que guarda los números de las etapas en las que se extrae líquido.
- NOPEQ : Vector que guarda los números de las etapas en las que se transfiere calor con alguna corriente exterior.
- NOPEV : Vector que guarda los números de las etapas en las que se extrae vapor.
- P : Matriz que guarda los parámetros p en la solución de las matrices tridiagonales de todos los componentes presentes en la columna.
- PC : Vector que guarda las presiones críticas de todos los componentes presentes en la columna, en PSIA.
- PM : Vector que guarda los pesos moleculares de todos los componentes presentes en la columna.
- P1 : Presión de operación de la columna, en PSIA.
- Q : Matriz que guarda los parámetros q en la solución de las matrices tridiagonales de todos los componentes presentes en la columna.
- QC : Vector que guarda las cantidades de calor transferido de todas las etapas en las que se lleva a cabo esta transferencia.

- S : Nombre de la función que calcula la sumatoria de las fracciones mol en la fase líquida, multiplicadas por sus constantes de equilibrio líquido-vapor respectivas.
- SUM : Variable auxiliar en el cálculo del nuevo perfil de vapor.
- SUM2 : Valor del criterio de convergencia.
- T : Vector que guarda las temperaturas de todas las etapas, en °R.
- TB : Vector que guarda las temperaturas de ebullición normales de todos los componentes presentes en la columna, en °R.
- TC : Vector que guarda las temperaturas críticas de todos los componentes presentes en la columna, en °R.
- TD : Temperatura del domo de la columna, en °R.
- TF : Temperatura del fondo de la columna, en °R.
- TITULO : Título para el problema.
- T1 : Vector que guarda las temperaturas de todas las etapas de la columna de la iteración anterior, en °R.
- U1 : Líquido que se obtiene del condensador (1a. etapa), en lb mol.
- V : Vector que guarda las cantidades de vapor de todas las etapas de la columna, en lb mol.
- VAT : Vector que guarda las cantidades alimentadas a la columna, en lb mol.
- VAV : Vector que guarda las cantidades de vapor alimentadas a

la columna, en lb mol.

- VC : Vector que guarda los volúmenes críticos de todos los componentes presentes en la columna, en $\text{ft}^3/\text{lb mol}$.
- VCTE : Variable auxiliar en el cálculo del perfil inicial de vapor.
- VEL : Vector que guarda las cantidades de líquido extraídas de la columna, en lb mol.
- VEQ : Vector que guarda las cantidades de calor transferidas en las etapas en las que se lleva a cabo esta transferencia, en BTU/lb mol.
- VEV : Vector que guarda las cantidades de vapor extraídas de la columna, en lb mol.
- V1 : Vapor extraído del condensador (1a. etapa), en lb mol.
- W : Vector que guarda los factores acéntricos de todos los componentes presentes en la columna.
- X : Matriz que guarda las fracciones mol de todos los componentes presentes en la columna, en todas las etapas, en la fase líquida.
- XF : Matriz que guarda las fracciones mol de todos los componentes presentes en la columna, en todas las corrientes de alimentación a la misma, en la fase líquida.
- XSUM : Sumatoria de las fracciones mol de todos los componentes presentes en la columna, en la fase líquida (su valor se calcula para todas las etapas de la columna).
- X1 : Matriz que guarda las fracciones mol normalizadas de to

dos los componentes presentes en la columna, en la fase líquida.

- YSUM : Sumatoria de las fracciones mol de todos los componentes presentes en la columna, en la fase vapor (su valor se calcula para todas las etapas de la columna).
- Y1 : Matriz que guarda las fracciones mol normalizadas de todos los componentes presentes en la columna, en la fase vapor.
- ZC : Vector que guarda los factores de compresibilidad críticos de todos los componentes presentes en la columna.

EJEMPLO DE CALCULO.

Se quiere separar una mezcla de 9 componentes a una presión de 250 PSIA. Para lograrlo se dispone de una columna con 21 etapas, las cuales incluyen un condensador parcial y un rehervidor. Se tienen dos corrientes de alimentación y se extraen también dos corrientes.

La primera corriente de alimentación consiste en 34.5 lb mol/hr de vapor saturado y se alimenta en la séptima etapa; la segunda consiste en 65.5 lb mol/hr de líquido saturado y se alimenta en la treceava etapa; las corrientes de salida se extraen de las etapas cuarta y décima sexta y tienen unos gastos respectivos de 15 y 25 lb mol/hr. La cantidad de vapor extraída del condensador es de 23 lb mol/hr y el reflujo del condensador es de 71.8 lb mol/hr.

La mezcla que se desea separar y las constantes de cada uno de sus componentes son :

	PM	TB	TC	PC	VC
METANO	16.04	201.1	343.3	673.0	1.59
ETANO	30.07	332.3	549.7	708.0	2.37
PROPANO	44.09	416.0	665.8	617.0	3.20
n-BUTANO	58.12	490.9	765.4	551.0	4.08
i -BUTANO	58.12	470.7	734.6	529.0	4.21
n-PENTANO	72.15	656.7	845.1	489.0	4.98

	PM	TB	TC	PC	VC
n-HEXANO	86.17	615.4	913.1	439.0	5.89
n-HEPTANO	100.20	668.9	972.5	397.0	6.82
n-OCTANO	114.22	718.0	1023.0	362.0	7.78

	ZC	W	CF	HV 25
METANO	0.290	0.013	-17.889	
ETANO	0.285	0.105	-20.236	
PROPANO	0.277	0.152	-24.820	81.76
n-BUTANO	0.274	0.201	-29.812	86.63
i -BUTANO	0.283	0.192	-31.452	78.63
n-PENTANO	0.269	0.252	-35.000	87.54
n-HEXANO	0.264	0.290	-39.960	87.50
n-HEPTANO	0.259	0.352	-44.890	87.18
n-OCTANO	0.256	0.408	-49.820	86.80

	AG	BG	CG
METANO	4.797650	$1.24471 \cdot 10^{-2}$	$2.8597 \cdot 10^{-6}$
ETANO	1.292850	$4.25354 \cdot 10^{-2}$	$-1.6569 \cdot 10^{-5}$
PROPANO	-1.008568	$7.31499 \cdot 10^{-2}$	$-3.7888 \cdot 10^{-5}$
n-BUTANO	-0.585433	$9.35864 \cdot 10^{-2}$	$-4.8483 \cdot 10^{-5}$
i -BUTANO	-2.128900	$1.00204 \cdot 10^{-1}$	$-5.5802 \cdot 10^{-5}$
n-PENTANO	-0.866195	$1.16434 \cdot 10^{-1}$	$-6.1629 \cdot 10^{-5}$
n-HEXANO	-1.054320	$1.38990 \cdot 10^{-1}$	$-7.4486 \cdot 10^{-5}$
n-HEPTANO	-1.229280	$1.61454 \cdot 10^{-1}$	$-8.7201 \cdot 10^{-5}$
n-OCTANO	-1.455570	$1.84159 \cdot 10^{-1}$	$-1.0020 \cdot 10^{-4}$

	DG	AL	BL
METANO	$-2.70310 \cdot 10^{-9}$	1.517540	-0.0171493
ETANO	$2.08148 \cdot 10^{-9}$	0.471189	$0.157500 \cdot 10^{-2}$
PROPANO	$7.67782 \cdot 10^{-9}$	0.433027	$0.391630 \cdot 10^{-3}$
n-BUTANO	$9.74318 \cdot 10^{-8}$	0.353969	$0.157717 \cdot 10^{-2}$
i -BUTANO	$1.21915 \cdot 10^{-8}$	0.145617	$0.370020 \cdot 10^{-2}$
n-PENTANO	$1.26705 \cdot 10^{-8}$	0.463639	$0.123658 \cdot 10^{-3}$
n-HEXANO	$1.55057 \cdot 10^{-8}$	0.577652	$-1.430800 \cdot 10^{-3}$
n-HEPTANO	$1.82892 \cdot 10^{-8}$	0.454958	$-3.460700 \cdot 10^{-4}$
n-OCTANO	$2.11500 \cdot 10^{-8}$	0.526048	$-9.570200 \cdot 10^{-4}$
	CL	DL	
METANO	$0.12379 \cdot 10^{-3}$	$-0.234160 \cdot 10^{-6}$	
ETANO	$-0.12017 \cdot 10^{-4}$	$-0.360170 \cdot 10^{-7}$	
PROPANO	$-0.21818 \cdot 10^{-5}$	$0.102882 \cdot 10^{-7}$	
n-BUTANO	$-0.79313 \cdot 10^{-5}$	$0.171717 \cdot 10^{-7}$	
i -BUTANO	$-0.16153 \cdot 10^{-4}$	$0.290403 \cdot 10^{-7}$	
n-PENTANO	$-0.21751 \cdot 10^{-5}$	$-5.102882 \cdot 10^{-7}$	
n-HEXANO	$5.00921 \cdot 10^{-6}$	$-2.019300 \cdot 10^{-9}$	
n-HEPTANO	$2.14820 \cdot 10^{-6}$	$-2.486000 \cdot 10^{-10}$	
n-OCTANO	$4.07363 \cdot 10^{-6}$	$-2.749800 \cdot 10^{-9}$	

Los valores de las entalpías de las corrientes de alimentación se calcularon previamente con la subrutina ENTALP (Capítulo IV, 1a. sección) y se dieron como datos al programa.

Las composiciones de estas corrientes y los valores de sus entalpías son :

Corriente de vapor saturado : (alimentada en la séptima etapa)

	X_F	H
METANO	0.08696	
ETANO	0.32884	
PROPANO	0.37682	
n-BUTANO	0.10595	
i -BUTANO	0.05797	-42805.0 BTU/lb mol.
n-PENTANO	0.04348	
n-HEXANO	0.0	
n-HEPTANO	0.0	
n-OCTANO	0.0	

Corriente de líquido saturado : (alimentada en la treceava etapa)

	X_F	H
METANO	0.0	
ETANO	0.0	
PROPANO	0.11669	
n-BUTANO	0.26936	
i -BUTANO	0.07089	-64721.0 BTU/lb mol.
n-PENTANO	0.24188	
n-HEXANO	0.14722	
n-HEPTANO	0.07852	
n-OCTANO	0.07547	

Este ejemplo convergió en seis iteraciones con el programa y las subrutinas que se presentan en las páginas siguientes. Con el fin de ilustrar la manera en la que varían los diferentes perfiles en las diferentes iteraciones, se presentan también las tablas de resultados obtenidos en cada una de ellas.

ES*RIUJLQ(1).MATRIX

```

1      EXTERNAL S
2      DIMENSION T(50,2),V(50),VAT(50),VAV(50),VEV(50),VEL(50),NOPAT(50),
3      /NOPAV(50),NOPEV(50),NOPEL(50),HL(50),HV(50),HA(50),P(20,50),
4      /G(20,50),X(20,50),Y1(20,50),XF(20,50),VEQ(50),NOPEQ(50),NLG(50),
5      /H(20),T1(50),C(20,50),R(20,50),A(20,50),D(20,50),COMPTE(20),
6      /TITULO(15)
7      COMMON/PROPS/COMP(2,20),PM(20),TB(20),TC(20),PC(20),VC(20),ZC(20),
8      /W(20),KTR0L(20),PCOR(20),CS(20),AG(20),BG(20),CG(20),DG(20),AL(20)
9      /,BL(20),CL(20),DL(20),CF(20),VAR1(160),HV25(20)
10     COMMON/CEQ/ CE(20,50),X1(20,50),NCOMP,J,P1
11     REAL L1
12     NAMELIST /TEMP/ T /VAPOR/ V
13     READ(5,57)NPLAT,NCOMP,TITULO
14     READ(5,65) (COMPTE(I),I=1,NCOMP)
15     DO 1 I=1,NCOMP
16     READ(5,64) COMP(1,I),COMP(2,I),PM(I),TB(I),TC(I),PC(I),VC(I),ZC(I)
17     /,w(I),CF(I),HV25(I)
18     1 READ(5,58) AG(I),BG(I),CG(I),DG(I),AL(I),RL(I),CL(I),DL(I)
19     READ(5,59) V1,U1,R1,L1,TD,TF,P1
20     READ(5,59) NPAT,NPAV,NPEV,NPEL,NPEQ
21     NPAT1 = NPAT + 1
22     NPEV1 = NPEV + 1
23     NPAV1 = NPAV + 1
24     NPEL1 = NPEL + 1
25     NPEQ1 = NPEQ + 1
26     READ(5,59) (NOPAT(I),VAT(I),I=2,NPAT1),(NOPAV(I),VAV(I),I=2,NPAV1)
27     /,(NOPEV(I),VEV(I),I=2,NPEV1),(NOPEL(I),VEL(I),I=2,NPEL1),(NOPEQ(I)
28     /,VEQ(I),I=2,NPEQ1)
29     READ(5,59)((XF(I,J),I=1,NCOMP),NLG(J),T1(J),HA(J),J=2,NPAT1)
30     DO 2 J = 2,NPAT1
31     DO 2 I=1,NCOMP
32     2 IF(XF(I,J).LE.0.0) XF(I,J) = 0.00001
33     ITER = 0
34     C PERFIL INICIAL/DE TEMPERATURAS
35     11 DTPP = (TF - TD)/(NPLAT - 1)
36     T(1,1)=TD
37     DO 3 J=2,NPLAT
38     3 T(J,1) = T(J-1,1) + J*TPP
39     C PERFIL INICIAL DE VAPOR
40     D1 = V1 + U1
41     V(1)=V1
42     NOPAV(1)=1
43     VAV(1)=-((L1+U1)
44     NOPAV(NPAV + 2) = NPLAT
45     NPAV2 = NPAV + 2
46     DO 4 J=2,NPAV2
47     N2=NOPAV(J-1)+1
48     N3=NOPAV(J)
49     N4=NOPAV(J-1)
50     VCTE = V(N4) - VAV(J-1)
51     DO 4 I=N2,N3
52     4 V(I)=VCTE
53     NOPEV(1)=2
54     VEV(1)=0.0
55     NOPEV(NPEV+2)=NPLAT
56     NPEV2 = NPEV + 2
57     IF(NOPAV(2).EQ.2) JEV = 3
58     IF(NOPAV(2).NE.2) JEV = 2
59     DO 7 J=JEV,NPEV2
60     N2=NOPEV(J-1)+1

```

```

61      N3=NUPEV(J)
62      N4=NUPEV(J-1)
63      DO 7 I=V2,N3
64      7 V(I) = V(I) + VEV(J-1)
65 C CALCULO DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO
66      DO 13 I=1,NPLAT
67      13 CALL EQUIL2(P1,CL(I,I),NCOMP,T(I,1))
68 C CALCULO DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL
69      15 DO 27 I=1,NCOMP
70      C(I,1)=V(2)*CE(I,2)
71      B(I,1)=-V(1)*CE(I,1)+U1+L1)
72      A(I,2)=V(2)-D1
73      B(I,2)=-V(2)*CE(I,2)+V(3)-D1)
74      IF(NUPEV(2).EQ.2) B(I,2) = B(I,2) + VEV(2)*(1.0 - CE(I,2))
75      IF(NUPAT(2).EQ.2) B(I,2) = B(I,2) - VAT(2)
76      NPLATO = NPLAT - 1
77      DO 16 J=3,NPLATO
78      A(I,J)=V(J)-D1
79      K1=2
80      K2=2
81      K3=2
82      JU = J - 1
83      DO 18 K=2,JU
84      IF(NUPAT(K).NE.K) GO TO 16
85      A(I,J)=A(I,J)+VAT(K)
86      K1=K1+1
87      16 IF(NUPEV(K2).NE.K) GO TO 17
88      A(I,J)=A(I,J)-VEV(K2)
89      K2=K2+1
90      17 IF(NUPEL(K3).NE.K) GO TO 18
91      A(I,J)=A(I,J)-VEL(K3)
92      K3=K3+1
93      18 CONTINUE
94      DO 25 J=3,NPLATO
95      B(I,J)=-V(J)*CE(I,J)+V(J+1)-D1)
96      K1=2
97      K2=2
98      K3=2
99      DO 19 II=2,J
100     IF(NUPEV(II).NE.J) GO TO 19
101     B(I,J)=B(I,J)-VEV(II)*CE(I,J)
102     GO TO 20
103     19 CONTINUE
104     DO 21 II=2,J
105     IF(NUPEL(II).NE.J) GO TO 21
106     B(I,J) = B(I,J) - VEL(II)
107     21 CONTINUE
108     DO 23 II=2,J
109     IF(NUPAT(K1).NE.II) GO TO 23
110     B(I,J)=B(I,J)-VAT(K1)
111     K1 = K1 + 1
112     23 IF(NUPEV(K2).NE.II) GO TO 24
113     B(I,J)=B(I,J)+VEV(K2)
114     K2=K2+1
115     24 IF(NUPEL(K3).NE.II) GO TO 25
116     B(I,J)=B(I,J)+VEL(K3)
117     K3=K3+1
118     25 CONTINUE
119     DO 26 J=2,NPLATO
120     C(I,J)=V(J+1)*CE(I,J+1)
121     A(I,NPLAT)=V(NPLAT)+U1

```

```

122      B(I,NPLAT)=-V(NPLAT)*CE(I,NPLAT)-R1
123      27 CONTINUE
124      C CALCULO DE LOS COEFICIENTES D DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL AUMENTADA
125      DO 28 I=1,NCOMP
126      D(I,1)=0.0
127      K1=2
128      DO 28 J=2,NPLAT
129      D(I,J)=0.0
130      IF(NOPAT(K1).NE.J) GO TO 28
131      D(I,J) = -VAT(K1)*XF(I,K1)
132      K1 = K1 + 1
133      28 CONTINUE
134      C SOLUCION DE LA MATRIZ TRIDIAGONAL
135      DO 30 I=1,NCOMP
136      P(I,1)=C(I,1)/B(I,1)
137      Q(I,1)=0.0
138      DO 29 J=2,NPLAT0
139      J1=J-1
140      P(I,J)=C(I,J)/(B(I,J)-A(I,J)*P(I,J1))
141      29 Q(I,J)=(D(I,J)-A(I,J)*Q(I,J1))/(B(I,J)-A(I,J)*P(I,J1))
142      N1=NPLAT-1
143      Q(I,NPLAT)=(D(I,NPLAT)-A(I,NPLAT)*Q(I,N1))/(B(I,NPLAT)-A(I,N
144      /PLAT)*P(I,N1))
145      X(I,NPLAT)=Q(I,NPLAT)
146      DO 30 K=1,N1
147      N2=NPLAT-K
148      N3 = N2 + 1
149      30 X(I,N2)=Q(I,N2)-P(I,N2)*X(I,N3)
150      C NORMALIZACION DE LAS FRACCIONES MOL EN TODOS LOS PLATOS
151      DO 9 J=1,NPLAT
152      XSUM = 0.0
153      DO 8 I=1,NCOMP
154      8 XSUM = X(I,J) + XSUM
155      DO 9 I=1,NCOMP
156      9 X1(I,J) = X(I,J)/XSUM
157      C CALCULO DEL NUEVO PERFIL DE TEMPERATURAS
158      IF(ITER.NE.0) GO TO 10
159      J = 1
160      CALL MULLER(N70,S,T(1,1)+10.0,T(1,1)-10.0,10.0,TD,1E-2)
161      J = NPLAT
162      CALL MULLER(N70,S,T(NPLAT,1)+10.0,T(NPLAT,1)-10.0,10.0,TF,1E-2)
163      ITER = 1
164      GO TO 11
165      10 DO 43 J=1,NPLAT
166      43 CALL MULLER(N43,S,T(J,1)+0.5*DTPP,T(J,1)-0.5*DTPP,-10.0,T(J,2),
167      /1E-2)
168      C CALCULO DE LAS ENTALPIAS EN CADA PLATO
169      DO 44 J=1,NPLAT
170      DO 44 I=1,NCOMP
171      44 Y1(I,J) = CE(I,J)*X1(I,J)
172      DO 5 JJ=1,NPLAT
173      YSUM = 0.0
174      DO 12 II=1,NCOMP
175      12 YSUM = Y1(II,JJ) + YSUM
176      DO 5 I=1,NCOMP
177      5 Y1(II,JJ) = Y1(II,JJ)/YSUM
178      DO 45 J=1,NPLAT
179      CALL ENTALP(NCOMP,T(J,2),X1(1,J),Y1(1,J),2,H,H1,H2)
180      HV(J) = H1
181      CALL ENTALP(NCOMP,T(J,2),X1(1,J),Y1(1,J),1,H,H1,H2)
182      45 HL(J) = H2

```

```

100 C CALCULO DEL NUEVO PERFIL DE VAPOR
104 K1=2
105 K2=2
106 Kb = 2
107 DO 51 J=3,NPLAT
108 V(J) = 0.0
109 IF(NUPLEV(K1).NE.(J-1)) GO TO 46
110 V(J) = V(J) + VEV(K1)*(HV(J-1) - HL(J-1))
111 K1=K1+1
112 46 IF(NOPAT(K2).NE.(J-1)) GO TO 47
113 V(J) = V(J) - VAT(K2)*(HA(K2) - HL(J-1))
114 K2=K2+1
115 47 IF(NUPEV(Kb).NE.J) GO TO 100
116 GC = VEV(Kb)
117 Kb = Kb + 1
118 100 K3=2
119 K4=2
120 K5=2
121 SUM = 0.0
122 IF(J.EQ.3) GO TO 72
123 J00 = J - 2
124 DO 50 K=2,J00
125 IF(NUPAT(K3).NE.K) GO TO 48
126 SUM=SUM+VAT(K3)
127 K3=K3+1
128 48 IF(NUPELV(K4).NE.K) GO TO 49
129 SUM=SUM-VEV(K4)
130 K4=K4+1
131 49 IF(NUPEL(K5).NE.K) GO TO 50
132 SUM=SUM-VEL(K5)
133 K5=K5+1
134 50 CONTINUE
135 72 SUM=SUM-01
136 51 V(J) = (V(J) + V(J-1)*(HV(J-1) - HL(J-1)) + (SUM + V(J-1))*(HL(J-1)
137 /) - HL(J-2)) + GC)/(HV(J) - HL(J-1))
138 C IMPRESION DE LOS RESULTADOS DE LA ITERACION
139 WRITE(6,62) TITULO
140 WRITE(6,63) ITER
141 WRITE(6,60) (COMPT(I),I=1,NCOMP)
142 DO 52 J=1,NPLAT
143 52 WRITE(6,61) J,T(J,2),V(J),(X(I,J),I=1,NCOMP)
144 C CONVERGENCIA DEL METODO
145 SUM2 = 0.0
146 DO 53 J=1,NPLAT
147 53 SUM2 = SUM2 + (T(J,2) - T(J,1))**2
148 IF(ABS(SUM2).LE.(0.01*NPLAT)) STOP
149 DO 56 J=1,NPLAT
150 56 T(J,1) = T(J,2)
151 ITER = ITER + 1
152 GO TO 15
153 57 FORMAT(2I2,12A6,A4)
154 58 FORMAT(8F10.0)
155 59 FORMAT( )
156 60 FORMAT(1X,'PLATO NO.',4X,'TEMPERATURA',11X,'VAPOR',T53,6(A4,9
157 /X),/,17X,'(G.R.)',12X,'(LB-MOL)',(T53,6(A4,9X)))
158 61 FORMAT(10,10X,F7.2,10X,F9.2,(T51,6(F8.6,5X)))
159 62 FORMAT('1',29X,12A6,A4,/)
160 63 FORMAT(60X,'ITERACION:',14,/)
161 64 FORMAT(2A6,F7.2,2F6.0,3F5.0,14X,F8.0,F6.2)
162 65 FORMAT(20A4)
163 70 WRITE(6,71)

```

```
244 71 FORMAT(41X,'NO SE PUEDE DETERMINAR PERFIL INICIAL DE TEMPERATURA')  
245 STOP  
246 END
```

ES*RIJOLE(1),EQUIL2

```

1  SUBROUTINE EQUIL2(P,CEQ,NCOMP,I)
2  DIMENSION CEQ(20),TEMPR(25),A(25,5)
3  COMMON/PROPS/COMP(2,20),PM(20),TA(20),TC(20),PC(20)
4  DATA TEMPR/0.640,62.0,64.0,66.0,68.0,70.0,72.0,74.0,76.0,78.0,80.0,
5  /0.35,0.30,0.95,1.0,1.1,1.2,1.3,1.4,1.5,1.6,1.7,1.8,1.9,2.0/
6  DATA (A(I,1),I=1,25)/8.25439578E+8,33057463E+8,35052607E+8,23468006E+8,
7  /10.267190E+8,10.3552824E+8,11.3098273E+8,11.224513E+8,11.333136E+8,11.6399759E+8,
8  /11.7505126E+8,12.4398816E+8,13.2655499E+8,14.1392108E+8,14.5445235E+8,10.3799437E+8,
9  /15.0506196E+8,15.9059891E+8,15.5100846E+8,15.4743398E+8,15.2975788E+8,14.6307474E+8,
10 /14.8033246E+8,14.9570994E+8,15.2733498E+8/
11 DATA (A(I,2),I=1,25)/-2.41558194E-1,1.18084252E-1,4.49666769E-1,
12 /-4.30407524E-2,-6.70019269E-1,-9.78141665E-1,-1.21566403E-1,-8.059912E-1,
13 /62E-1,-8.12395811E-1,-8.92655373E-1,-7.87305117E-1,-1.15003359E-1,
14 /-1.62527061E-2,-2.18532526E-2,-2.2401857E-2,-2.23727322E-2,-1.94324577E-2,
15 /-2.42395937E-1,-1.73786008E-1,-1.47664988E-1,-1.06786752E-1,-3.10314417E-1
16 /-3.54961038E-1,-4.07189608E-1,-6.14688396E-1/
17 DATA (A(I,3),I=1,25)/-1.94651484E-1,-3.27254683E-1,-4.29127216E-1,
18 /-2.68756807E-1,-7.98420012E-2,2.70340145E-2,1.22144282E-1,-1.29786E-1,
19 /134E-2,-4.8777163E-3,1.70761347E-2,-3.31454575E-2,-1.23871744E-1,
20 /2.82511473E-1,4.71768498E-1,4.6042396E-1,-1.0759384E-1,341071725E-1,
21 /485267818E+2,37511573E-1,1.50025666E-1,1.13624334E-3,-2.37466097E-1,
22 /-1.213915884E-1,-1.8383342E-1,-1.03829457E-1/
23 DATA (A(I,4),I=1,25)/1.72943436E-2,3.70026641E-2,4.92972918E-2,
24 /2.68809572E-2,2.36216937E-3,-1.32306106E-2,-2.88666375E-2,-1.07840E-2,
25 /56E-2,-1.28767416E-2,-1.56619626E-2,-6.44114985E-3,-3.33968028E-2,
26 /-5.47228083E-2,-8.18570033E-2,-7.5989157E-2,1.45299964E-1,-5.43136E-1,
27 /15E-2,-7.19710886E-2,-3.45902294E-2,-2.24670991E-2,-1.49875879E-4,
28 /3.14901844E-2,2.70367637E-2,2.11038515E-2,8.47474486E-3/
29 DATA (A(I,5),I=1,25)/3.30369454E-4,-7.06958584E-4,-1.23322709E-3,
30 /-1.24538783E-4,1.0240823E-3,1.81677542E-3,2.69651483E-3,1.83141883E-3,
31 /1.96608389E-3,2.08458235E-3,1.50307245E-3,3.04549861E-3,3.9913E-3,
32 /659E-3,5.35903312E-3,4.79956577E-3,-6.59865863E-3,3.26739834E-3,
33 /3.99155077E-3,1.97377475E-3,1.36085739E-3,1.72936706E-4,-1.3453589E-3,
34 /E-3,-1.0798177E-3,-7.13293673E-4,-2.92428304E-5/
35 DO 4 I=1,NCOMP
36 TR = T/TC(I)
37 IF(TR,LT,0.6,OR,TR,GT,2.0) WRITE(6,5) TR, I
38 PR = P/PC(I)
39 IF(PR,LT,0.01,OR,PR,GT,2.0) WRITE(6,6) PR, I
40 PR = ALOG(1000.0*PR)
41 II = 1
42 IF (TR .EQ. TEMPR(1)) GO TO 3
43 DO 1 II=2, 25
44 IF (TR,LE,TEMPR(II)) GO TO 2
45 1 CONTINUE
46 2 IF (TR,EQ,TEMPR(II)) GO TO 3
47 CEQI = (((A(II,1,5)*PR + A(II,1,4))*PR + A(II,1,3))*PR + A(II,1,2)
48 /*PR + A(II,1,1)
49 3 CEQ(I) = (((A(II,5)*PR + A(II,4))*PR + A(II,3))*PR + A(II,2))*PR +
50 /A(II,1)
51 IF (TR,EQ,TEMPR(II)) GO TO 4
52 CEQ(I) = (CEQ(I) - CEQI)/(TEMPR(II) - TEMPR(II-1))*(TR - TEMPR(II)
53 /* + CEQ(I)
54 4 CEQ(I) = EXP(CEQ(I))*0.001
55 RETURN
56 5 FORMAT(35X,'LA TEMPERATURA REDUCIDA ESTA FUERA DE RANGO TR=',F9.2,
57 /3X,'I=',I3)
58 6 FORMAT(37X,'LA PRESION REDUCIDA ESTA FUERA DE RANGO PR=',F9.2,3X,
59 /*I=',I3)
60 END

```

ES*RI00LG(1).S

```
1 FUNCTION S(T)
2 COMMON/CEG/ CE(20,50),X1(20,50),NCOMP,N,P1
3 S = -1.0
4 CALL EQUIL2(P1,CE(1,N),NCOMP,T)
5 DO 1 I=1,NCOMP
6 1 S = S + CE(I,N)*X1(I,N)
7 RETURN
8 END
```

EJEMPLO PARA UNA TORRE DE 21 PLATOS

ITERACION 1

PLATO NO.	TEMPERATURA (C.R.)	VAPOR (LR-MOL)	CH4 N-C6	C2H6 N-C7	C3H8 N-C8	T-C4	N-C6	N-C8
1	537.40	23.00	.013498 .000000	.239620 .000000	.649733 .000000	.043487	.035515	.000051
2	569.75	94.81	.004017 .000000	.137561 .000000	.760029 .000000	.092982	.096602	.000312
3	586.90	86.02	.003095 .000000	.090017 .000000	.761462 .000000	.158478	.207183	.001455
4	602.49	84.39	.002835 .000004	.066704 .000000	.654775 .000000	.221981	.366401	.005403
5	618.07	82.02	.002650 .000022	.053609 .000000	.506582 .000000	.267703	.542586	.016460
6	626.60	81.15	.002487 .000086	.046856 .000003	.386297 .000001	.269673	.640554	.036024
7	636.40	83.20	.002350 .000267	.041923 .000014	.297911 .000007	.238306	.643870	.063660
8	657.30	42.53	.000149 .001063	.010303 .000054	.240662 .000012	.264830	.811343	.088335
9	667.65	45.72	.000010 .003622	.002331 .000272	.188027 .000053	.259679	.895753	.123038
10	670.40	39.54	.000001 .010585	.000488 .001261	.145474 .000349	.231205	.872520	.168098
11	681.01	44.36	.000001 .026692	.000096 .005038	.113567 .002091	.289210	.766472	.215320
12	691.60	44.23	.000001 .058572	.000019 .017333	.090507 .010637	.245471	.615700	.253627
13	709.91	38.95	.000001 .111179	.000005 .051611	.073895 .046285	.206675	.455858	.272768
14	717.78	42.45	.000000 .118206	.000002 .053476	.047169 .047372	.098864	.454612	.303796
15	729.37	43.25	.000000 .128845	.000000 .056147	.026395 .048760	.081645	.416439	.337608
16	740.80	40.79	.000000 .146638	.000000 .060518	.011723 .051166	.057261	.337431	.374889
17	754.54	62.82	.000000 .166653	.000000 .066445	.004884 .054554	.036501	.249473	.390877
18	770.15	61.10	.000000 .185548	.000000 .074620	.001901 .059632	.021071	.167637	.378848
19	785.72	57.30	.000000 .198260	.000000 .085590	.000688 .068364	.011388	.101617	.330132
20	806.31	56.61	.000000 .201992	.000000 .100466	.000228 .086041	.005669	.054865	.275820
21	826.90	49.63	.000000 .192110	.000000 .119698	.000067 .122184	.002493	.025803	.197313

EJEMPLO PARA UNA TORRE DE 21 PLATOS

ITERACION 2

PLATO NO.	TEMPERATURA (G.R.)	VAPOR (LB-MOL)	CH4 N-C6	C2H6 N-C7	C3H8 N-C8	I-C4	N-C4	N-C5
1	540.44	23.00	.013909	.251636	.728647	.051007	.044772	.000172
			.000000	.000000	.000000			
2	571.59	94.81	.003844	.130830	.764020	.095469	.105423	.000877
			.000000	.000000	.000000			
3	586.90	87.39	.003177	.083251	.672181	.136836	.189895	.003296
			.000001	.000000	.000000			
4	599.13	83.57	.002999	.062935	.527838	.166073	.282073	.010001
			.000004	.000000	.000000			
5	610.26	74.15	.002885	.053933	.391036	.172083	.350744	.024975
			.000019	.000001	.000000			
6	615.89	72.94	.002805	.049864	.310499	.160488	.375086	.046669
			.000061	.000003	.000001			
7	623.66	75.84	.002665	.046381	.264250	.144577	.373399	.077047
			.000176	.000015	.000010			
8	649.51	40.69	.000163	.010795	.219289	.153660	.439894	.080797
			.000625	.000037	.000012			
9	659.84	41.48	.000011	.002395	.178235	.150381	.475770	.110903
			.002077	.000161	.000035			
10	666.02	41.93	.000002	.000520	.163289	.145966	.498710	.135161
			.006664	.000809	.000216			
11	675.22	41.60	.000001	.000110	.139053	.132305	.483036	.172585
			.019466	.003794	.001535			
12	683.81	38.98	.000001	.000024	.119580	.113650	.433361	.216936
			.051272	.016036	.009910			
13	707.24	37.27	.000001	.000007	.105437	.090718	.347613	.238475
			.113239	.055720	.051350			
14	711.86	35.78	.000000	.000003	.083761	.092820	.366148	.250432
			.116188	.056386	.051648			
15	720.57	38.13	.000000	.000001	.057606	.090345	.375865	.271372
			.122308	.058707	.053472			
16	726.08	36.86	.000000	.000000	.032122	.081973	.374274	.308331
			.133797	.062640	.056336			
17	736.75	59.74	.000000	.000000	.017179	.069344	.350969	.343122
			.148292	.067513	.059433			
18	747.34	59.21	.000000	.000000	.009657	.053467	.302823	.367464
			.166067	.074336	.064207			
19	760.75	60.34	.000000	.000000	.004134	.037632	.239800	.375734
			.186499	.083830	.071346			
20	776.51	60.41	.000000	.000000	.001760	.022614	.163647	.348501
			.204452	.099882	.087766			
21	801.15	55.91	.000000	.000000	.000650	.011849	.093849	.287405
			.212115	.124252	.124459			

EJEMPLO PARA UNA TORRE DE 21 PLATOS

ITERACION 3

PLATO NO.	TEMPERATURA (G.R.)	VAPOR (LB-MOL)	CH4	C2H6	C3H8	I-C4	N-C4	N-C5
			N-C6	N-C7	N-C8			
1	538.53	23.00	.013665	.245190	.688551	.044627	.036235	.000137
			.000000	.000000	.000000			
2	569.19	94.81	.003795	.126902	.713871	.082132	.083733	.000681
			.000000	.000000	.000000			
3	583.70	86.25	.003128	.081529	.634053	.118627	.151898	.002574
			.000000	.000000	.000000			
4	594.85	81.60	.003063	.064329	.513020	.148253	.233752	.002113
			.000002	.000000	.000000			
5	605.36	78.15	.003077	.057785	.401477	.162947	.308672	.021805
			.000012	.000000	.000000			
6	611.07	75.19	.003247	.058111	.342644	.160155	.345094	.043082
			.000042	.000002	.000001			
7	617.77	74.65	.003052	.054302	.301386	.149910	.358628	.075246
			.000130	.000014	.000010			
8	645.54	41.02	.000190	.013128	.247117	.161325	.425557	.096742
			.000490	.000031	.000012			
9	656.95	42.59	.000012	.003009	.201351	.158784	.466020	.103919
			.001740	.000134	.000030			
10	664.64	42.94	.000002	.000671	.169444	.150183	.486726	.131481
			.005872	.000708	.000197			
11	673.22	43.99	.000001	.000146	.146674	.136395	.480260	.171298
			.018430	.003618	.001448			
12	683.81	41.53	.000001	.000033	.130307	.116998	.433827	.216428
			.051791	.016409	.010168			
13	707.24	37.08	.000001	.000009	.108290	.088780	.335570	.238001
			.116600	.058254	.054067			
14	711.88	34.75	.000000	.000004	.092405	.091857	.351827	.243946
			.117189	.057903	.053454			
15	716.62	35.96	.000000	.000002	.068117	.091400	.362872	.255285
			.120645	.059148	.054457			
16	724.46	35.86	.000000	.000000	.041190	.087808	.371093	.270047
			.127100	.061460	.056247			
17	731.60	61.59	.000000	.000000	.024023	.080934	.368998	.307937
			.134954	.063692	.057584			
18	739.54	62.58	.000000	.000000	.013355	.069723	.346142	.338614
			.147005	.067132	.059215			
19	747.96	60.07	.000000	.000000	.006872	.054251	.297168	.359708
			.166762	.075344	.064368			
20	765.72	61.92	.000000	.000000	.003175	.036665	.224193	.352194
			.192977	.092382	.080225			
21	768.36	56.57	.000000	.000000	.001249	.020317	.140504	.318492
			.218762	.126105	.125544			

EJEMPLO PARA UNA TORRE DE 21 PLATOS

ITERACION 4

PLATO NO.	TEMPERATURA (G.R.)	VAPOR (LB-MOL)	CH4 N-C6	C2H6 N-C7	C3H8 N-C8	I-C4	N-C4	N-C5
1	536.73	23.00	.013806 .000000	.247642 .000000	.674648 .000000	.039901	.030324	.000099
2	507.34	94.81	.003844 .000000	.129743 .000000	.712653 .000000	.075281	.071902	.000510
3	501.52	85.87	.003207 .000000	.084497 .000000	.646285 .000000	.112139	.134390	.002000
4	592.30	81.54	.003187 .000002	.067822 .000000	.535932 .000000	.144084	.214624	.006614
5	603.01	78.24	.003180 .000009	.060428 .000000	.424891 .000000	.164202	.297539	.018760
6	611.07	77.35	.003221 .000036	.058838 .000002	.362447 .000001	.168389	.349217	.039784
7	617.77	77.06	.003159 .000118	.056773 .000013	.322009 .000010	.160810	.370320	.072611
8	645.54	43.19	.000200 .000465	.014033 .000030	.264128 .000012	.174799	.444720	.083338
9	656.95	44.41	.000013 .001706	.003275 .000131	.212070 .000029	.172563	.489889	.100789
10	604.64	44.18	.000002 .005851	.000737 .000706	.174441 .000186	.161296	.509540	.128342
11	673.22	44.37	.000001 .018456	.000161 .003630	.145429 .001453	.143507	.497260	.169349
12	683.81	40.84	.000001 .052177	.000036 .016565	.125585 .010273	.120318	.444072	.217833
13	707.24	36.31	.000001 .117403	.000009 .058777	.106042 .054596	.088955	.335879	.238550
14	711.86	33.63	.000000 .117722	.000005 .058574	.090477 .054262	.090911	.347036	.242249
15	716.62	35.16	.000000 .119870	.000002 .059155	.068971 .054636	.091386	.359354	.250791
16	724.46	36.79	.000000 .123473	.000001 .059862	.042863 .054907	.088421	.368548	.267684
17	729.83	61.44	.000000 .128786	.000000 .061151	.025234 .055453	.081631	.363820	.289504
18	737.71	61.68	.000000 .139383	.000000 .064689	.014147 .057830	.070973	.341883	.316008
19	747.96	63.50	.000000 .157638	.000000 .071449	.007639 .061703	.058316	.306283	.345191
20	761.45	62.42	.000000 .186904	.000000 .089339	.003665 .077398	.041431	.241420	.354632
21	786.32	58.71	.000000 .221297	.000000 .126846	.001502 .126015	.024283	.159314	.328524

EJEMPLO PARA UNA TORRE DE 21 PLATOS

ITERACION 5

PLATO NO.	TEMPERATURA (G.R.)	VAPOR (LB-MOL)	CH4 N-C6	C2H6 N-C7	C3H8 N-C8	I-C4	N-C4	N-C5
1	535.57	23.00	.013946 .000000	.250525 .000000	.666976 .000000	.037494	.027683	.000081
2	507.34	94.81	.003886 .000000	.132365 .000000	.714347 .000000	.072075	.067080	.000430
3	581.52	85.61	.003253 .000000	.086661 .000000	.656763 .000000	.109746	.127869	.001744
4	592.30	80.97	.003224 .000002	.069591 .000000	.552250 .000000	.143901	.209586	.005927
5	603.01	76.63	.003207 .000009	.061664 .000000	.438791 .000000	.167133	.298104	.017317
6	611.07	73.76	.003139 .000035	.057948 .000002	.367205 .000001	.172198	.352905	.037382
7	617.77	72.40	.003065 .000118	.055432 .000013	.322113 .000010	.165352	.378537	.069968
8	645.54	38.33	.000195 .000467	.013766 .000029	.260631 .000011	.178931	.454520	.081672
9	656.95	39.27	.000013 .001719	.003224 .000132	.207314 .000029	.175993	.500493	.100470
10	664.64	38.95	.000002 .005911	.000727 .000715	.169870 .000188	.163862	.519830	.129667
11	673.22	39.21	.000001 .018660	.000159 .003677	.142189 .001473	.145147	.505621	.171094
12	683.81	36.51	.000001 .052674	.000035 .016752	.124434 .010398	.121035	.448573	.220271
13	708.89	34.39	.000001 .118259	.000009 .059309	.106156 .055140	.088920	.336267	.239567
14	711.86	31.47	.000000 .118150	.000005 .058880	.091577 .054597	.091191	.347949	.242603
15	716.62	32.93	.000000 .119176	.000002 .058753	.070431 .054226	.092053	.361085	.249782
16	722.89	33.39	.000000 .122807	.000001 .059703	.043522 .054846	.088466	.367827	.255313
17	729.83	59.54	.000000 .127886	.000000 .060955	.025926 .055465	.082293	.365260	.286957
18	737.71	61.72	.000000 .136690	.000000 .063094	.014718 .056253	.072470	.346841	.313636
19	746.15	60.88	.000000 .154672	.000000 .070146	.007797 .060778	.058565	.306205	.340425
20	761.45	61.26	.000000 .185327	.000000 .088290	.003792 .076256	.042402	.245358	.354156
21	766.32	58.39	.000000 .221509	.000000 .126878	.001552 .126024	.024930	.162467	.330022

EJEMPLO PARA UNA TORRE DE 21 PLATOS

ITERACION 6

PLATO NO.	TEMPERATURA (G.R.)	VAPOR (LB-MOL)	CH4 N-C6	C2H6 N-C7	C3H8 N-C8	I-C4	N-C4	N-C5
1	535.57	23.00	.014037	.252700	.665719	.038098	.029478	.000102
			.000000	.000000	.000000			
2	557.34	94.81	.003892	.133074	.711604	.073143	.071351	.000538
			.000000	.000000	.000000			
3	581.52	84.03	.003262	.086947	.652860	.111193	.135811	.002178
			.000000	.000000	.000000			
4	592.30	78.30	.003244	.069906	.547668	.145386	.221977	.007382
			.000002	.000000	.000000			
5	603.01	73.80	.003270	.062516	.433846	.167486	.313033	.021380
			.000011	.000000	.000000			
6	611.07	72.53	.003282	.059930	.363650	.169228	.361593	.044541
			.000040	.000002	.000001			
7	617.77	73.09	.003252	.058130	.321169	.159001	.375658	.078978
			.000130	.000014	.000011			
8	645.54	38.35	.000204	.014275	.263649	.172657	.451089	.091737
			.000507	.000032	.000013			
9	656.95	39.22	.000013	.003306	.212751	.170168	.495619	.111389
			.001845	.000143	.000032			
10	664.64	39.14	.000002	.000737	.176794	.158763	.513013	.140676
			.006269	.000762	.000202			
11	673.22	39.62	.000001	.000160	.149554	.141034	.497247	.181901
			.019566	.003873	.001559			
12	683.81	36.96	.000001	.000035	.131322	.118178	.440152	.226926
			.054614	.017447	.010875			
13	708.89	34.32	.000001	.000009	.108109	.086705	.328751	.241331
			.120116	.060422	.056260			
14	711.86	30.78	.000000	.000005	.094581	.088870	.339351	.244073
			.120018	.060018	.055738			
15	716.62	32.20	.000000	.000002	.073734	.089774	.351376	.250672
			.121278	.060202	.055756			
16	722.89	32.91	.000000	.000001	.046982	.088076	.363782	.265981
			.124141	.060537	.055710			
17	729.83	60.18	.000000	.000000	.028301	.082446	.362654	.286315
			.128217	.061123	.055595			
18	737.71	62.06	.000000	.000000	.016052	.072395	.343189	.312025
			.137595	.063951	.057258			
19	746.15	61.19	.000000	.000000	.008682	.059619	.307748	.340891
			.155284	.070572	.061259			
20	761.45	62.49	.000000	.000000	.004246	.043334	.247376	.354697
			.185538	.088380	.076366			
21	786.32	59.74	.000000	.000000	.001740	.025501	.163924	.330576
			.221667	.126886	.126026			

CAPITULO XVI

T FLASH

CALCULO DE TANQUES SEPARADORES DE MALLA

Prácticamente todas las operaciones de un proceso requieren la separación de material arrastrado, ya sea como un paso secundario o como una operación independiente. Estas separaciones pueden ser (1) :

1. - De partículas líquidas y vapor o gas.
2. - De partículas líquidas y otro líquido inmiscible.
3. - De partículas sólidas y vapor o gas.
4. - De partículas sólidas y líquidos.

Para el primer caso, el tipo de separador más empleado es el de malla. Como su nombre lo sugiere, las partículas se separan haciéndolas chocar contra una malla, que se forma con alambre de 0.003 a 0.016 pulgadas o más de diámetro, en tejidos que miden 4, 6 o 12 pulgadas de grueso. El material de la malla puede ser casi cualquiera que se pueda tejer : acero inoxidable, níquel, cobre, aluminio, acero al carbón, polietileno, etc.

La forma usual de seleccionar un separador de malla es determinar la velocidad máxima permitida y, a partir de ésta, seleccionar el diámetro del recipiente. En el caso de que el recipiente ya exista, el procedimiento es determinar la velocidad y en base a ella, determinar la malla adecuada.

La velocidad permitida de vapor se determina como :

$$V_a = k \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}}$$

donde :

V_a : Velocidad máxima permitida de vapor, en ft/seg

ρ_L : Densidad de líquido, lb/ft³

ρ_V : Densidad de vapor, lb/ft³

k : Factor de correlación, basado en la aplicación.

El factor k es función del tamaño de la gota de líquido, de la viscosidad del líquido, de su cantidad, del espacio libre, tipo de tejido, etc.

A continuación se dan ciertos valores recomendados (1) (separación entre la malla y la superficie del líquido de al menos 12").

Servicio	k	Tipo de malla
Fluidos limpios, cantidad moderada de líquido (cubre 90 % de los casos).	0.35, 0.36	Standard
	0.35	Alta eficiencia
	0.25	Muy alta eficiencia
Alta viscosidad, sólidos suspendidos sucios	0.40	Baja densidad, Altos flujos
Vacío :		
2" Hg. abs.	0.20	Standard o
16" Hg. abs.	0.27	Alta eficiencia

Reactivos	0.21	Plástico o alambre forra <u>do</u>
Corrosivos		do con plástico.

Variación de k con el espacio libre (2) :

Espacio (in)	k
3	0.12
4	0.15
5	0.19
6	0.22
7	0.25
8	0.29
9	0.32
10	0.35
11	0.38
12	0.40
13	0.42
14	0.43

(No es usual, sin embargo, emplear valores mayores de 0.40).

Las velocidades muy bajas permiten que las partículas de líquido pasen a través de la malla. Las velocidades muy altas acumularán líquido en la malla, al grado de inundarla prácticamente y permiten que el líquido vuelva a ser arrastrado por el vapor. Sin embargo, el rango de operación es bastante grande (30-100 % de la velocidad permitida), siendo el mínimo permitido un 10 % del calculado por la ecuada

ción. La velocidad de inundación de la malla está entre 120 y 140 % de la velocidad máxima.

La velocidad de diseño, tomando en cuenta vibraciones, variaciones en la carga de líquido y efectos del tamaño de partículas, debe tomarse como (1) :

$$V_D = 0.75 V_a$$

Si se observan estos rangos de velocidad, la eficiencia (relación de cantidad de líquido retenida a cantidad total de líquido) se encuentra entre .98 y .99 (1).

El programa T FLASH se basa en los criterios anteriores para calcular el diámetro del recipiente. Los datos necesarios son :

- El gasto de vapor, en ft³/min.
- Densidad del líquido, en lb/ft³.
- Densidad del vapor, en lb/ft³.
- Coeficiente k (si no se da, se supone 0.35).
- Incremento de diámetro para dar lugar al anillo que soportará la malla (si no se da, se supone 4").

Con estos datos, el programa calcula la velocidad máxima y la de di

seño (75 %), con la cual calcula un diámetro que se ajusta a los diámetros comerciales (que normalmente aumentan en múltiplos de 6").

Con el diámetro encontrado, se calcula la velocidad real. Si ésta excede el 80 % de la velocidad máxima, se prueba el siguiente diámetro. Como resultado se dan la velocidad real, la máxima y el diámetro encontrado.

NOMENCLATURA DEL PROGRAMA

T FLASH

- A : Area, ft^2
- CFM : Gasto volumétrico de vapor, ft^3/min .
- D : Diámetro, ft.
- K : Constante de servicio.
- RHOL : Densidad del líquido, lb/ft^3 .
- RHOV : Densidad del vapor, lb/ft^3 .
- SUP : Diferencia de diámetro para dar cabida al soporte de la malla, ft.
- VD : Velocidad de diseño, ft/seg .
- VMAX : Velocidad máxima, ft/seg .
- VREAL : Velocidad real, ft/seg .

EJEMPLO DE CALCULO

Este programa se corrió con el ejemplo 4-2 de la referencia (1). Se trata de diseñar un tanque "flash" para separar el etileno líquido arrastrado por la corriente de gas para las siguientes condiciones :

Volumen de vapor : 465 cfm a -110°F y 35 psig.

Densidad del vapor : 0.3 lb/ft^3 .

Densidad del líquido : 33 lb/ft^3 .

Los resultados se presentan en el listado correspondiente.

ES*RI00LQ(1).TFLASH

```

1      1 FORMAT ( )
2      2 FORMAT ('1',58X,'** D A T O S **',/,38X,'PIES CURICUS/MIN',T72,F1
3      -0.2,/,38X,'DENSIDAD DEL LIQUIDO',T72,F10.2,2X,'LB/FT**3',/,38X,'DE
4      -NSIDAD DEL VAPOR',T72,F10.2,2X,'LB/FT**3',/,38X,'CONSTANTE DE SERV
5      -ICIO',T72,F10.2,/,38X,'DIF. DIAM. POR SOPORTE',T72,F10.2,2X,'FT')
6      3 FORMAT('0',56X,'R E S U L T A D O S',/,38X,'VELOCIDAD MAXIMA',T72
7      -,F10.2,2X,'FT/SEG',/,38X,'VELOCIDAD REAL',T72,F10.2,2X,'FT/SEG',/,
8      -58X,'DIAMETRO DE MALLA',T72,F10.2,2X,'FT')
9      REAL K
10     READ 1, CFM, RHOL, RHOV, K, SUP
11     IF (K .EQ. 0.0) K = 0.35
12     IF (SUP .EQ. 0.0) SUP = 0.33333333
13     PRINT 2, CFM, RHOL, RHOV, K, SUP
14     VMAX = SQRT((RHOL - RHOV)/RHOV)*K
15     VD = 0.75*VMAX
16     A = CFM/(60.0*VD)
17     D = AINT(SQRT(A*5.0929582) + 2.0*SUP)*0.5
18     4 VREAL = CFM/((D - SUP)**2*47.12389)
19     IF (VREAL .GT. 0.8*VMAX) GO TO 5
20     PRINT 3, VMAX, VREAL, D
21     STOP
22     5 D = D + 0.5
23     GO TO 4
24     END

```

527

** D A T O S **

PIES CUBICOS/MIN	465.00	
DENSIDAD DEL LIQUIDO	33.00	LB/FT**3
DENSIDAD DEL VAPOR	.30	LB/FT**3
CONSTANTE DE SERVICIO	.35	
DIF. DIAM. POR SOPORTE	.33	FT

R E S U L T A D O S

VELOCIDAD MAXIMA	3.65	FT/SEG
VELOCIDAD REAL	2.10	FT/SEG
DIAMETRO DE MALLA	2.50	FT

SECCION III

CAPITULO XVII

SUBROUTINA INTEGRFD.

A veces es necesario en ingeniería química calcular la integral de alguna función. Esta integración puede hacerse de manera analítica en algunos casos, pero en otros la función es complicada y entonces la única manera de evaluar su integral es numéricamente. En este capítulo se presenta el método de integración numérica conocido como la Regla de Simpson.

ANALISIS MATEMATICO.

La regla de Simpson es un caso de integración cerrada empleando cotas de Newton. Las fórmulas de integración cerrada emplean información de la función $f(x)$ en los dos límites de integración. Se supone que la función $f(x)$ puede ser calculada o que se conoce solamente en puntos base $(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$, igualmente espaciados por un incremento h y por lo tanto la selección lógica para la representación polinomial es una forma basada en diferencias finitas.

En el caso de la regla de Simpson, el polinomio está dado en términos de diferencias finitas hacia adelante, por medio de la fórmula de Newton :

$$\begin{aligned}
 f(x_0 + h) &= f(x_0) + \alpha \Delta f(x_0) \\
 &+ \frac{\alpha(\alpha - 1)}{2!} \Delta^2 f(x_0) + \frac{\alpha(\alpha - 1)(\alpha - 2)}{3!} \Delta^3 f(x_0) \\
 &+ \dots \dots \dots +
 \end{aligned}$$

$$+ \frac{\alpha(\alpha - 1)(\alpha - 2) \dots (\alpha - n + 1)}{n!} \Delta^n f(x_0)$$

$$+ R_n(x_0 + \alpha h)$$

donde :

$$\alpha = \frac{(x - x_0)}{h}$$

$R_n(x_0 + \alpha h)$ es el término de error :

$$R_n(x_0 + \alpha h) = h^{n+1} \alpha(\alpha + 1)(\alpha - 2) \dots (\alpha - n)$$

$$+ \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \text{ donde } \xi = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$$

: Es el operador de diferencia hacia adelante y se define como :

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$$

$$\Delta^2 f(x) = \Delta(\Delta f(x)) = \Delta(f(x+h) - f(x))$$

$$= \Delta f(x+h) - \Delta f(x)$$

$$\Delta^3 f(x) = \Delta^2 f(x+h) - \Delta^2 f(x)$$

.....

$$\Delta^n f(x) = \Delta^{n-1} f(x+h) - \Delta^{n-1} f(x)$$

Empleando la fórmula de Newton de diferencias finitas hacia adelante que se acaba de describir, se tiene en términos generales (si α es el número de incrementos iguales a h entre los dos límites de integración) :

$$\int_a^b f(x) dx = h \int_0^\alpha f(x) dx$$

Sustituyendo x por $x_0 + \alpha h$ se tiene :

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= h \int_0^\alpha f(x_0 + \alpha h) d\alpha = \\ &= h \left[\alpha f(x_0) + \frac{\alpha^2}{2} \Delta f(x_0) + \left(\frac{\alpha^3}{6} - \frac{\alpha^2}{4} \right) \Delta^2 f(x_0) \right. \\ &+ \left(\frac{\alpha^4}{24} - \frac{\alpha^3}{6} + \frac{\alpha^2}{6} \right) \Delta^3 f(x_0) + \\ &+ \left(\frac{\alpha^5}{120} - \frac{\alpha^4}{16} + \frac{11\alpha^3}{72} - \frac{\alpha^2}{8} \right) \Delta^4 f(x_0) + \\ &+ \dots \dots \dots \left. \right] \end{aligned}$$

El término de error está dado por :

$$\begin{aligned} h \int_0^\alpha R_n(x_0 + \alpha h) d\alpha &= h^{n+1} \cdot \\ &\cdot \int_0^\alpha \left[(\alpha - 1)(\alpha - 2) \dots (\alpha - n) \cdot \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \right] d\alpha \end{aligned}$$

Si α es par (el número de puntos base es *nón*), se puede observar que el término $\Delta^{\alpha+1} f(x_0)$ es igual a cero.

En la regla de Simpson α es igual a 2 y se tiene :

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= h \int_0^2 f(x_0 + \alpha h) d\alpha = \\ &= h \left[2 f(x_0) + 2 \Delta f(x_0) + \frac{1}{3} \Delta^2 f(x_0) + \right. \\ &+ 0 \Delta^3 f(x_0) + \dots \dots \left. \right] \end{aligned}$$

Sustituyendo los valores de las ordenadas a partir de la definición de las diferencias finitas hacia adelante y empleando nada más los términos que aparecen en la última ecuación se tiene :

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)$$

Esta última ecuación es la Regla de Simpson.

En este caso, el error no se puede dar con n (número de puntos base) igual a 2, debido al término que se hace cero y se calcula con n igual a 3, pero siempre es muy pequeño. En el caso de la Regla de Simpson, la fórmula es exacta para polinomios de orden 3 o menor, así como en todos los casos en los que α es par la fórmula general exacta para polinomios es de orden $\alpha + 1$ o menor.

METODO DE SOLUCION.

Como se acaba de ver, si α es igual a dos, se requieren cuando menos tres puntos para calcular una integral por la Regla de Simpson.

Un cálculo de integración numérica es más preciso mientras mayor número de puntos se tomen para llevarla a cabo y por lo tanto, si se emplea la Regla de Simpson, se ve que es necesario tener en todo el intervalo un número de puntos impar, de manera de poderlos tomar de tres en tres y que el último punto de una tercia de puntos sea el primero de la tercia que le sigue.

Entonces se puede concluir que la Regla de Simpson es muy precisa si se hace una buena subdivisión del intervalo, tomando el mayor número posible de puntos, siempre que este número sea impar.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina INTEGFD calcula la integral de una función empleando la Regla de Simpson que se describió anteriormente. La subrutina está dividida en dos partes, según se tenga la función o las parejas de valores (abscisas y sus ordenadas respectivas) y se entra a la subrutina por un punto diferente según sea el caso :

En el primero de ellos, cuando se tiene la función se debe llamar a INTEGF en la proposición CALL; la subrutina evaluará las ordenadas en las abscisas que se le manden.

Los parámetros que se requieren en este caso son :

- F : Función de la cual se quiere la integral (se tiene que declarar en un subprograma de función y hacerse externa en la unidad de programa que llame a INTEGF).
- N : Número de puntos en el intervalo de integración (contando el primero y el último); N es impar.
- H : Valor del incremento (diferencia entre dos valores de abscisas consecutivas).
- X : Vector de valores de las abscisas (pueden ser 98 como máximo).

La subrutina regresa a la unidad de programa que la llame los siguientes valores :

Y : Vector de valores de las ordenadas evaluadas en cada una de las abscisas que se le hayan mandado.

S : Valor de la integral.

Si por error se manda un número par en N, así como un número par de abscisas la subrutina calculará un valor más sumando el valor de H al último del vector X.

En el segundo caso se debe llamar a INTEGD en la proposición CALL y los parámetros que se requieren son :

&n : Donde n es una etiqueta en la unidad del programa que llame a la subrutina; esta etiqueta debe preverse para el caso en el que por error se tenga un número par de datos, ya que en este caso la subrutina no puede calcular un nuevo valor de las abscisas al no disponer de la función.

N : Número de puntos en el intervalo de integración (contando el primero y el último).

H : Valor del incremento (diferencia entre dos valores de abscisas consecutivas).

X : Vector de valores de las abscisas (pueden ser 99 como máximo).

Y : Vector de valores de las ordenadas correspondientes a las abscisas en el vector X.

En este caso, la subrutina regresará a la unidad de programa que la haya llamado el valor de la integral : S.

El verdadero nombre de la subrutina es INTEGF e INTEGD se define en una proposición ENTRY; sin embargo, tratándose de una subrutina para el cálculo específico de integración, se unieron los dos nombres y en el capítulo se presenta con el nombre de INTEGFD. (Nótese que este nombre tiene siete letras y por lo tanto no puede ser el nombre de una subrutina).

NOMENCLATURA.

S 2 : Sumatoria de las ordenadas de los puntos nones (sin contar el primero y el último).

C 4 : Sumatoria de las ordenadas de los puntos pares.

EJEMPLO DE CALCULO.

Como ejemplo para ilustrar el empleo de la subrutina INTEGRFD se escogieron dos funciones, las cuales se declararon en subprogramas de función como EJINT1 y EJINT2.

EJINT1 es un polinomio del cuarto grado :

$$\text{EJINT1} = 5.0 + X + 2.1 \cdot X^2 + 3.2 \cdot X^3 + 4.5 \cdot X^4$$

la cual se desea integrar entre $X = 1$ y $X = 4$.

Se escogieron entonces 81 puntos con un valor de H igual a 0.05, y

EJINT2 es una expresión compuesta por funciones trigonométricas :

$$\text{EJINT2} = \text{COS}(X) \cdot \text{SEN}(X) + \text{SEN}^3(X)$$

y se desea integrar entre 0° y 180° ; se escogieron 51 puntos con un valor de H igual a 0.062831853 radianes (3.6 grados).

Para calcular estas integrales se hizo un programa principal que hiciera externas a las funciones EJINT1 y EJINT2 y que calculara los valores de las abscisas para las dos funciones en sus intervalos de integración respectivos. Como en los dos casos se tiene la función, la entrada se hace a INTEGRFD por INTEGRF.

Los listados del programa principal, de la subrutina INTEGRFD, de los subprogramas de funciones para EJINT1 y EJINT2 así como el resultado de la integral obtenido para los dos ejemplos, aparecen en las páginas siguientes.

ES*RIUJL0(1).INTEGFDMAIN

```

1      DIMENSION X(100),Y(100)
2      EXTERNAL EJINT1,EJINT2
3      H1 = 0.05
4      X(1) = 1.0
5      DO 1 I = 2,81
6      1 X(I) = H1*(I-1) + X(1)
7      CALL INTEGf(EJINT1,81,H1,X,Y,S1)
8      H2 = 0.062831853
9      X(1) = 0.0
10     DO 2 I = 2, 51
11     2 X(I) = H2*(I-1)
12     CALL INTEGf(EJINT2,51,H2,X,Y,S2)
13     PRINT 4, S1, S2
14     4 FORMAT('1',//////,57X,'FUNCION POLINOMIAL:',//,45X,'RESULTADO DE LA
15     / INTEGRAL ENTRE 1 Y 5:',8X,F10.4,//////,55X,'FUNCION TRIGONOMETRICA
16     /:',//,45X,'RESULTADO DE LA INTEGRAL ENTRE 0 Y PI:',8X,F10.4)
17     STOP
18     END

```

ES*RIQJLQ(1).INTEGFD

```

1      SUBROUTINE INTEG (F,N,H,X,Y,S)
2      DIMENSION Y(100),X(100)
3      S = N*0.5
4      IF (2.0*S.NE.N) GO TO 1
5      N = N + 1
6      X(N) = X(N-1) + H
7      1 DO 2 I=1,N
8      2 Y(I) = F(X(I))
9      GO TO 3
10     ENTRY INTEGD (*,N,H,X,Y,S)
11     S = N*0.5
12     IF (2.0*S.EQ.N) RETURN 1
13     3 S = Y(1) + Y(N)
14     S4 = 0.0
15     S2 = 0.0
16     N1 = N-1
17     DO 4 I=2,N1,2
18     4 S4 = S4 + Y(I)
19     N2 = N-2
20     DO 5 I=3,N2,2
21     5 S2 = S2 + Y(I)
22     S = (S + 2.0*S2 + 4.0*S4)*H/3.
23     RETURN
24     END

```

```
ES*RIQJLQ(1).EJINT1
```

```
1      FUNCTION EJINT1(X)  
2      EJINT1 = (((4.5*X + 3.2)*X + 2.1)*X + 1)*X + 5  
3      RETURN  
4      END
```

ES*RIOJLQ(1).EJINT2

```
1      FUNCTION EJINT2(X)
2      EJINT2 = COS(X)*SIN(X) + SIN(X)**3
3      RETURN
4      END
```

FUNCION POLINOMIAL:

RESULTADO DE LA INTEGRAL ENTRE 1 Y 5: 3431.7233

FUNCION TRIGONOMETRICA:

RESULTADO DE LA INTEGRAL ENTRE 0 Y PI: 1.3346

CAPITULO XVIII

SUBRUTINA REGULA

Existen varios métodos para llegar a la solución de una ecuación trascendental; sin embargo, uno de los que causa menos problemas y da un resultado bastante preciso es el de Regula-Falsi. Muchas de las ecuaciones empleadas en ingeniería química son muy complejas y métodos de solución basados en el empleo de derivadas se pueden emplear sólo si se da una estimación buena. Otros métodos se pueden emplear pero el resultado no es tan preciso como el obtenido con los métodos anteriores. Con el método de Regula-Falsi no hay problema a menos que las diferentes raíces de la ecuación estén bastante cerca una de otra, por lo tanto, se escogió éste último para llegar a la solución de algunas ecuaciones complejas.

METODO DE SOLUCION.

En este método se busca un intervalo en el que se considere que está la raíz de la ecuación, o sea, que los valores de la función en cada uno de los dos extremos tengan signo contrario. Una vez establecido el intervalo se procede por medio de interpolaciones lineales para llegar a la raíz de la ecuación :

Si X_1 es el límite inferior del intervalo y X_2 es el superior y si X_n es el valor calculado en la interpolación, se tiene que :

X_n representa un valor de X el cual, si no es igual a la raíz, es de cualquier manera más aproximado que los dos valores con los que se empezó y por lo tanto debe de tomar el lugar de uno de los dos límites de intervalo; para lograr esto se procede de la manera siguiente :

Se multiplica el valor de la función valuada en X_n por el valor de la función valuada en cualquiera de los dos límites del intervalo; si este producto es negativo, entonces la raíz de la ecuación se encuentra del mismo lado del intervalo que el límite escogido; si el producto es positivo, la raíz se encuentra del otro lado. En el primer caso, el valor de X calculado sustituye al otro límite del intervalo inicial y en el segundo caso sustituye al límite escogido al hacer el producto. Se sigue de esta manera, obteniendo nuevos valores de X , los cuales serán cada vez más aproximados a la raíz y el proceso se detiene cuando el valor de la función se acerca a cero con una cierta tolerancia, o bien cuando la diferencia entre el valor de X calculado en una iteración y el valor calculado en la siguiente es también cercana a cero.

DESCRIPCION DE LA SUBRUTINA.

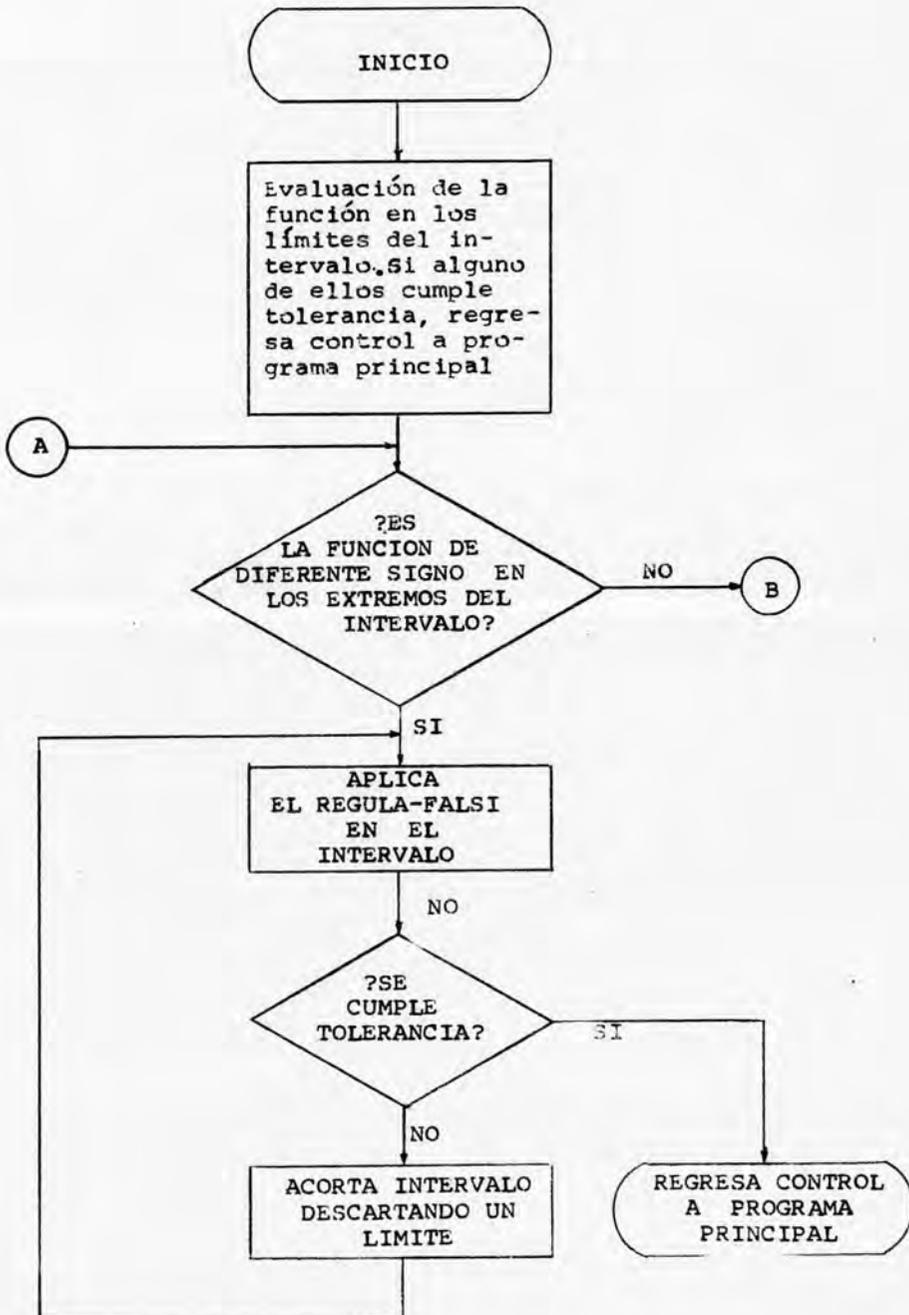
La subrutina REGULA encuentra la raíz de una ecuación arbitraria por el método de Regula-Falsi. Con el fin de facilitar la elección del intervalo inicial para el cálculo, se buscó la manera para que la misma subrutina fuera capaz de ampliarlo en el caso de que no hubiera raíces. Se logró este objetivo empleando un parámetro con un valor constante, el cual se le manda en la lista de argumentos; la persona que emplee esta subrutina puede fijar este valor como más le convenga. En el caso de que el intervalo inicial no contenga ninguna raíz, REGULA ampliará primero el intervalo hacia la izquierda, cada vez en un tamaño igual al valor del parámetro; si al haber hecho esta ampliación 50 veces no se encuentra todavía ninguna raíz, se repetirá el cálculo hacia la derecha; si después de otras 50 veces no se encuentra un intervalo adecuado, la subrutina imprimirá un mensaje indicando que no hay raíces en el intervalo y los límites del mismo una vez que se amplió hacia los dos lados. Si en el proceso de ampliación se determina la existencia de una solución, REGULA acercará los dos límites a una distancia igual al valor del parámetro y comenzará la búsqueda de la solución exacta de la ecuación; de esta manera el procedimiento se agiliza y se puede llegar más rápidamente al resultado.

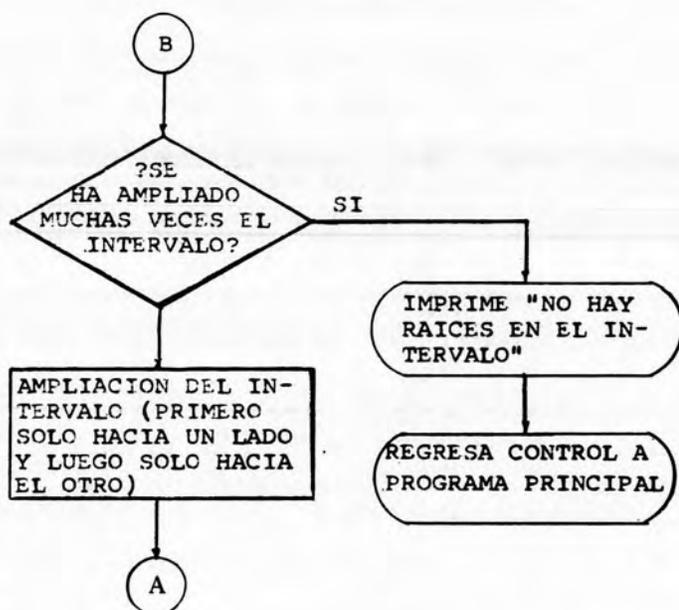
La subrutina REGULA requiere de los siguientes datos para poder llevar a cabo la búsqueda de la raíz de una ecuación :

- F : Función que se quiere resolver.
- LIM1 : Límite inferior de la variable independiente.
- LIM2 : Límite superior de la variable independiente.
- Al : Parámetro para ampliar el intervalo inicial en el caso de que no contenga raíces.

REGULA regresará al programa principal el valor de la raíz de la ecuación, el cual tiene como nombre Z, en la lista de argumentos.

En el caso de que no se encuentre ninguna raíz en el intervalo ampliado, REGULA imprimirá el mensaje antes mencionado y regresará el control a una proposición etiquetada en el programa principal, por medio de un RETURN no standard. Se dejó esta proposición así como el número de su etiqueta (el cual debe aparecer también en lista de argumentos precedido por un &) a elección del usuario, para que emplee los que más le convengan de acuerdo al problema al que aplique esta subrutina.

SUBROUTINA DE REGULA-FALSI
DIAGRAMA DE BLOQUES



NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA

R E G U L A

- A 1 : Valor con el cual se incrementa el intervalo inicial cuando es necesario.
- F : Función que se desea resolver.
- F G : Variable auxiliar en la aplicación del Régula-Falsi.
- F I : Variable auxiliar, guarda el último valor de F I. y sirve como control.
- F 1 : Valor de la función F evaluada en LIM1.
- F 2 : Valor de la función F evaluada en LIM2.
- LIM1, LIM2 : Intervalo de tanteo.
- LIM11, LIM22 : Intervalo inicial.
- TOL : Tolerancia.
- Z : Raiz de la función.
- Z 1 : Variable auxiliar en la aplicación del Régula-Falsi.

EJEMPLO DE CALCULO.

Como ejemplo para mostrar el empleo de la subrutina REGULA, se propone el cálculo del factor de compresibilidad por medio de la ecuación de Redlich-Kwong.

La ecuación de Redlich-Kwong es una ecuación de estado de dos constantes y tiene la forma :

$$P + \frac{a}{T^{0.5} \cdot V \cdot (V + b)} \cdot (V - b) = RT$$

Empleando esta ecuación, el factor de compresibilidad se calcula de la siguiente manera :

$$Z = 1/(1-h) - (a'_m{}^2/b'_m) \cdot h/(1+h)$$

donde :

$$h = b'_m \cdot P \cdot Z$$

$$a'_m = \sum a_i \cdot y_i$$

$$b'_m = \sum b_i \cdot y_i$$

y :

$$a_i{}^2 = 0.4378 / T_{ri}{}^{2.5} \cdot P_{ci} \text{ atm}^{-1}$$

$$b_i = 0.0867 / T_{ri} \cdot P_{ci} \text{ atm}^{-1}$$

Rearreglando esta ecuación, se obtiene una ecuación cúbica en el factor de compresibilidad, la cual se puede resolver por medio de la sub

rutina REGULA :

$$F(Z) = Z^3 - Z^2 - Z \cdot (b'_m \cdot P^2 + b'_m \cdot P - a'_m \cdot P) - a'_m \cdot P^2 \cdot b'_m \cdot P^2$$

a'_i y b'_i son las constantes de la ecuación de Redlich-Kwong para un componente puro y a'_m y b'_m son las constantes para una mezcla de varios componentes. T_r es la temperatura reducida y P_c es la presión crítica.

Supóngase que se tiene la siguiente mezcla, a 52.02 atm y 322°K :

COMPONENTE	FRACCION MOL
Hidrógeno	0.5621
Acido Sulfhídrico	0.1329
Metano	0.1765
Etano	0.0544
Propano	0.0132
i - Butano	0.0015
n - Butano	0.0014
n - Pentano	0.0580

Para calcular el factor de compresibilidad, se hizo un pequeño programa que calculara las constantes de mezcla de la ecuación de Redlich-Kwong y llamará a la subrutina REGULA. La ecuación de Redlich-Kwong se define como función en una subrutina y se hace externa para man

darla como parámetro a la subrutina REGULA.

Más adelante aparece un listado de este pequeño programa, de la función y de la subrutina REGULA, así como los resultados obtenidos para este problema.

CS*RIQJLQ(1).RKMAIN/R

```

1  DIMENSION Y(8), PC(8), TC(8), TIT(8), A(8), B(8)
2  COMMON /BLOCK1/ AC, BC, P, NEV
3  DATA TIT/'HIDROG', 'ACSULF', 'METANO', 'ETANO', 'PROPAN', 'IBUTAN', 'NBU
4  -TAN', 'NPENTA'/
5  EXTERNAL RK
6  READ 7, NCOMP, T, P, Y, PC, TC
7  FORMAT ( )
8  AC = 0.0
9  BC = 0.0
10 DO 1 I=1, NCOMP
11  A(I) = SQRT(0.4278*(TC(I)/T)**2.5/PC(I))
12  B(I) = 0.0867*TC(I)/(PC(I)*T)
13  AC = AC + A(I)*Y(I)
14  1 BC = BC + B(I)*Y(I)
15  PRINT 6
16  CALL REGULA(N8, RK, 0.9, 1.1, 0.018, Z, 1E-5)
17  8 PRINT 3
18  DO 2 I=1, NCOMP
19  2 PRINT 4, TIT(I), TC(I), PC(I), Y(I)
20  PRINT 5, Z
21  3 FORMAT ('1', ///, 37X, 'COMPONENTE', 5X, 'TEMP. CRIT.', 5X, 'PRESION CRIT.',
22  -, 5X, 'COMPOSICION', ///)
23  4 FORMAT (39X, A6, 9X, F6.2, 11X, F5.2, 12X, F6.4, /)
24  5 FORMAT (49X, 'FACTOR DE COMPRESIBILIDAD = ', F6.4)
25  6 FORMAT ('1', ///, 57X, 'PROCESO ITERATIVO:', /, 34X, 'EVALUACION', 5X, 'FAC
26  -TOR DE COMPRESIBILIDAD', 5X, 'RESULTADO DE LA R. K.', ///)
27  STOP
28  END

```

ES*RIQJLQ(1).REGULA

```

1      SUBROUTINE REGULA (*, F, LIM11, LIM22, AB, Z, TOL)
2      IMPLICIT REAL (L)
3      1 FORMAT ('0',14X,'NO HAY RAICES EN EL INTERVALO ',2(1PE9.2,1X))
4      A1 = AB
5      LIM1 = LIM11
6      LIM2 = LIM22
7      C   INICIALIZACION Y TOMA DE DECISION DE AMPLIAR O NO EL INTERVALO
8      K = 1
9      F1 = 0.0
10     F2 = F(LIM2)
11     IF (ABS(F2) .LT. TOL) GO TO 8
12     2 F1 = F(LIM1)
13     IF (ABS(F1) .LT. TOL) GO TO 7
14     IF (F1+F2 .LT. 0.0) GO TO 4
15     C   AMPLIACION DEL INTERVALO (LIM2 NO SE MUEVE NUNCA EN ESTA FASE)
16     IF (A1 .EQ. 0.0) GO TO 10
17     K = K + 1
18     F1 = F1
19     IF (K .GT. 100) GO TO 9
20     IF (K .EQ. 51) GO TO 3
21     LIM1 = LIM1 - A1
22     GO TO 2
23     3 A1 = -A1
24     LIM1 = LIM2 - A1
25     GO TO 2
26     C   APLICACION DEL REGULA-FALSI EN EL INTERVALO CORRECTO
27     4 IF (F1 .EQ. 0.0) GO TO 5
28     LIM2 = LIM1 + A1
29     F2 = F1
30     5 Z1 = Z
31     Z = LIM1 + F1*(LIM2 - LIM1)/(F1 - F2)
32     IF (ABS((Z1-Z)/Z) .LE. 1E-5) RETURN
33     FG = F(Z)
34     IF (ABS(FG) .LT. TOL) RETURN
35     IF (FG*F1 .GT. 0.0) GO TO 6
36     LIM2 = Z
37     F2 = FG
38     GO TO 5
39     6 LIM1 = Z
40     F1 = FG
41     GO TO 5
42     7 Z = LIM1
43     RETURN
44     8 Z = LIM2
45     RETURN
46     9 LIM1 = A1*50.0
47     LIM2 = LIM22 - LIM1
48     LIM1 = LIM11 + LIM1
49     10 WRITE (6, 1) LIM1, LIM2
50     RETURN 1
51     END

```

ES*RIQJLQ(1).RK/RNM

```
1      FUNCTION RK(Z)
2      COMMON /BLOCK1/ A, B, P, NEV
3      RK = ((Z - 1.0)*Z - B)*Z - A
4      NEV = NEV + 1
5      PRINT 1, NEV, Z, RK
6      1 FORMAT (3BX,I3,18X,F6.4,17X,1PE11.4)
7      RETURN
8      END
```

EVALUACION	PROCESO ITERATIVO: FACTOR DE COMPRESIBILIDAD	RESULTADO DE LA R. K.
1	1.1000	7.6419-02
2	.9000	-1.2536-01
3	1.0243	-1.9052-02
4	1.0394	-1.9828-03
5	1.0409	-1.9757-04
6	1.0411	-1.9609-05
7	1.0411	-1.9572-06

COMPONENTE	TEMP. CRIT.	PRESION CRIT.	COMPOSICION
HIDROG	33.30	12.80	.5621
ACSULF	373.60	88.90	.1329
METANO	190.66	45.80	.1765
ETANO	305.26	48.80	.0544
PROPAN	369.96	42.00	.0132
IBUTAN	407.16	37.00	.0015
NBUTAN	426.16	36.00	.0014
NPENTA	470.36	33.00	.0580

FACTOR DE COMPRESIBILIDAD = 1.0411

CAPITULO XIX

SUBROUTINA NEWTON.

Otro de los métodos más empleados para resolver ecuaciones transcendentales es el de Newton-Raphson, sin embargo éste puede causar problemas en la búsqueda de la raíz de una ecuación, ya que se calcula la derivada en los diferentes puntos que se van obteniendo y divide entre este valor. De este modo, si se tiene un máximo o un mínimo cerca de la raíz, la derivada se hace cero y el método falla. En los casos en los que se puede aplicar, este método es muy eficiente y se puede llegar a la solución en muy pocas iteraciones.

METODO DE SOLUCION.

El método de Newton-Raphson consiste en buscar la tangente a una curva en un punto A; el valor de X donde la tangente a la curva corta el eje de las abscisas se toma como una aproximación a la raíz. Una vez evaluado este valor de X, se calcula el valor correspondiente de la función y se vuelve a determinar la pendiente, en ese nuevo punto; de esta manera el nuevo valor de X es cada vez más cercano a la raíz de la ecuación y finalmente se llega a la solución. De esta manera se tiene :

Pendiente de la tangente a la curva en el punto X_1 :

$$m = \frac{f(X_1) - 0}{X_1 - X_2}$$

donde X_2 es el valor de X donde la tangente intercepta al eje de las

abscisas.

Despejando se tiene :

$$X_2 = X_1 - \frac{f(X_1)}{f'(X_1)}$$

y para la n-ésima evaluación :

$$X_{n+1} = X_n - \frac{f(X_n)}{f'(X_n)}$$

El proceso se detiene cuando la diferencia entre X_{n+1} y X_n , en valor absoluto, es menor que un cierto valor o bien, cuando el valor absoluto de la función evaluada en X_{n+1} es muy pequeño (menor que una cierta tolerancia).

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

NEWTON es una subrutina pequeña, basada en el método de Newton-Raphson que se acaba de describir y se puede encontrar la raíz de cualquier función (tomando en cuenta la restricción que se describió anteriormente). Con el fin de no tener que definir dos funciones (la función misma y su derivada), se empleó un método que requiere na da más de la función para poder evaluar la pendiente a la curva. Es te método consiste en lo siguiente :

- Se suma una cierta cantidad al valor de X, obteniéndose X_1 (en NEWTON este valor es igual a $X \cdot 10^{-5}$).
- Se evalúa la función en X_1 , obteniéndose $f(X_1)$.
- La pendiente a la curva en el punto X se obtiene entonces como :

$$[f(X_1) - f(X)] / (X_1 - X)$$

La subrutina NEWTON calcula un nuevo valor de X, como se describió anteriormente y la solución de la ecuación se determina cuando el valor de la función, en valor absoluto, es menor de 10^{-5} . El método puede no converger para una cierta función y para este efecto la subrutina tiene un contador del número de iteraciones; en el caso que es te número de evaluaciones sea mayor que 50, se imprimirá un mensaje y el control regresará al programa principal mediante un RETURN no standard.

Los parámetros que requiere NEWTON son :

F : Función cuya raíz se quiere determinar.

API : Valor inicial de X.

La subrutina regresará el valor de la raíz de la función (el cual tiene el nombre de X en la lista de parámetros) al programa principal.

La etiqueta de la proposición para el RETURN no standard, así como la proposición misma, se dejan libres para el usuario.

EJEMPLO DE CALCULO

El ejemplo que se propuso para ilustrar el empleo de la subrutina NEWTON es el cálculo de la raíz de la ecuación de Redlich y Kwong para el factor de compresibilidad. Este ejemplo es el mismo que se propuso para la subrutina REGULA (descrita en el capítulo anterior, la mezcla de hidrocarburos propuesta también es la misma); sin embargo, se empleó el mismo ejemplo con el fin de que se pudieran comparar los dos métodos : en los resultados, tanto para REGULA como para NEWTON, aparece una hoja donde se muestra el número de evaluaciones, el valor del factor de compresibilidad en cada iteración y el valor correspondiente de la función. Se podrá observar en estas hojas cómo el número de evaluaciones es el mismo con los dos métodos pero que con el método de Newton-Raphson la función se acercó mucho más a cero que con el método de Regula-Falsi.

El programa principal para resolver el problema es el mismo que se empleó para REGULA, lo único que se cambió fue la llamada a la subrutina.

En las páginas siguientes aparece un listado del programa principal, de la subrutina NEWTON y de los resultados obtenidos para el ejemplo.

```

ES*RIQJLQ(1).RKMAIN/N
 1 DIMENSION Y(8), PC(8), TC(8), TIT(8), A(8), B(8)
 2 COMMON /BLOCK1/ AC, BC, P, NEV
 3 DATA TIT/'HIDROG', 'ACSULF', 'METANO', 'ETANO', 'PROPAN', 'IBUTAN', 'NBU
 4 -TAN', 'NPENTA'/
 5 EXTERNAL RK
 6 READ 7, NCOMP, T, P, Y, PC, TC
 7 FORMAT ( )
 8 AC = 0.0
 9 BC = 0.0
10 DO 1 I=1, NCOMP
11 A(I) = SQRT(0.4278*(TC(I)/T)**2.5/PC(I))
12 B(I) = 0.0867*TC(I)/(PC(I)*T)
13 AC = AC + A(I)*Y(I)
14 BC = BC + B(I)*Y(I)
15 PRINT 6
16 CALL NEWTON(NB, RK, 1.0, Z)
17 PRINT 3
18 DO 2 I=1, NCOMP
19 PRINT 4, TIT(I), TC(I), PC(I), Y(I)
20 PRINT 5, Z
21 PRINT 3
22 3 FORMAT ('1', //, 37X, 'COMPONENTE', 5X, 'TEMP. CRIT.', 5X, 'PRESION CRIT.',
23 - , 5X, 'COMPOSICION', ///)
24 4 FORMAT (39X, A6, 9X, F6.2, 11X, F5.2, 12X, F6.4, /)
25 5 FORMAT (49X, 'FACTOR DE COMPRESIBILIDAD = ', F6.4)
26 6 FORMAT ('1', //, 57X, 'PROCESO ITERATIVO:', /, 34X, 'EVALUACION', 5X, 'FAC
27 -TOR DE COMPRESIBILIDAD', 5X, 'RESULTADO DE LA R. K.', ///)
28 STOP
END

```

ES*RIOJLQ(1).NEWTON

```
1      SUBROUTINE NEWTON (*,F,AP1,X)
2      N = 0
3      X = AP1
4      1 FX = F(X)
5      IF (ABS(FX) .LT. 1E-5) RETURN
6      X1 = X*(1.0 + 1E-5)
7      X = X - 1E-5*X/((F(X1)-FX)/FX)
8      N = N + 1
9      IF (N.GT.50) GO TO 2
10     GO TO 1
11     2 WRITE (6,3)
12     RETURN 1
13     3 FORMAT (///,28X,'NO CONVERGE ALGORITMO EN N-R',///)
14     END
```

EVALUACION	PROCESO ITERATIVO: FACTOR DE COMPRESIBILIDAD	RESULTADO DE LA R. K.
1	1.0000	-4.4472-02
2	1.0000	-4.4462-02
3	1.0445	4.0580-03
4	1.0445	4.0703-03
5	1.0411	1.9665-05
6	1.0411	3.1817-05
7	1.0411	-7.4506-09

COMPONENTE	TEMP.CRIT.	PRESION CRIT.	COMPOSICION
HIDROG	33.30	12.80	.5621
ACSULF	373.60	88.90	.1329
METANO	190.66	45.80	.1765
ETANO	305.26	48.80	.0544
PROPAN	369.96	42.00	.0132
IBUTAN	407.16	37.00	.0015
NBUTAN	426.16	36.00	.0014
NPENTA	470.36	33.00	.0580

FACTOR DE COMPRESIBILIDAD = 1.0411

CAPITULO XX

SUBROUTINA I N V E R S.
INVERSION DE MATRICES

DEFINICION DEL PROBLEMA.

En Ingeniería Química se encuentran a veces problemas que involucran la solución de sistemas de ecuaciones simultáneas. Existen varios métodos para la solución de estos sistemas tales como el de eliminación y el de determinantes; sin embargo, cuando los sistemas son muy grandes y complejos, estos métodos no son aplicables ya que involucrarían un gran número de cálculos y las posibilidades de error aumentarían considerablemente.

A continuación se analiza un método que permite resolver el problema de una manera rápida y sin mucho riesgo de error. El método se denomina inversión de matrices.

MODELO MATEMATICO.

Considérese un sistema de n ecuaciones simultáneas con n incógnitas :

$$a_{11} X_1 + a_{12} X_2 + a_{13} X_3 + \dots \dots \dots a_{1n} X_n = C_1$$

$$a_{21} X_1 + a_{22} X_2 + a_{23} X_3 + \dots \dots \dots a_{2n} X_n = C_2$$

.....

$$a_{n1} X_1 + a_{n2} X_2 + a_{n3} X_3 + \dots \dots \dots a_{nn} X_n = C_n$$

Este sistema se puede representar en forma matricial de la siguiente

manera :

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \cdot \\ X_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ C_n \end{bmatrix}$$

Por lo tanto el problema de encontrar los valores de las n incógnitas X_1, X_2, \dots, X_n , se reduce a resolver la ecuación matricial anterior.

METODO DE SOLUCION.

La ecuación matricial que se acaba de escribir puede representarse por :

$$A \cdot X = C$$

para poder obtener el vector X se tiene que multiplicar a la izquierda la ecuación anterior por la matriz inversa de A , A^{-1} , de esta manera se tiene :

$$A^{-1} \cdot A \cdot X = A^{-1} \cdot C$$

$$X = A^{-1} \cdot C$$

El problema consiste entonces en encontrar la matriz A^{-1} . Para llegar a ella se emplea el método de Gauss Jordan, el cual se describe a continuación :

Supóngase que se tiene la matriz de 3×3 :

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

La matriz idéntica es :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Las operaciones que se hacen sobre la matriz A se deben hacer también sobre la matriz idéntica :

Paso 1.

- Se divide el primer renglón por a_{11} , tenemos :

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \frac{a_{13}}{a_{11}} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se obtiene un nuevo segundo renglón sumándole $-a_{21}$ x 1er. renglón nuevo :

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \frac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - a_{21} \cdot \frac{a_{12}}{a_{11}} & a_{23} - a_{21} \cdot \frac{a_{13}}{a_{11}} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 & 0 \\ -a_{21} \cdot \frac{1}{a_{11}} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se obtiene un nuevo tercer renglón sumándole $-a_{31}$ x 1er. renglón nuevo :

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \frac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - a_{21} \cdot \frac{a_{12}}{a_{11}} & a_{23} - a_{21} \cdot \frac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{32} - a_{31} \cdot \frac{a_{12}}{a_{11}} & a_{33} - a_{31} \cdot \frac{a_{13}}{a_{11}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 & 0 \\ -a_{21} \cdot \frac{1}{a_{11}} & 1 & 0 \\ -a_{31} \cdot \frac{1}{a_{11}} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Sustituyendo por b's en la primera matriz y por b's en la segunda, se tiene :

$$\begin{bmatrix} 1 & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b'_{11} & 0 & 0 \\ b'_{21} & 1 & 0 \\ b'_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Paso 2.

- Se divide el segundo renglón por b_{22} , se tiene :

$$\begin{bmatrix} 1 & b_{12} & b_{13} \\ 0 & 1 & \frac{b_{23}}{b_{22}} \\ 0 & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b'_{11} & 0 & 0 \\ \frac{b'_{21}}{b_{22}} & \frac{1}{b_{22}} & 0 \\ b'_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se obtiene un nuevo 1er. renglón sumándole $-b_{12}$ x nuevo segundo renglón :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & b_{13} - b_{12} \cdot \frac{b_{23}}{b_{22}} \\ 0 & 1 & \frac{b_{23}}{b_{22}} \\ 0 & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b'_{11} - b_{12} \cdot \frac{b'_{21}}{b_{22}} & -b_{12} \cdot \frac{1}{b_{22}} & 0 \\ \frac{b'_{21}}{b_{22}} & \frac{1}{b_{22}} & 0 \\ b'_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se obtiene un nuevo tercer renglón sumándole $-b_{32}$ x nuevo segundo renglón :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & b_{13} - b_{12} \cdot \frac{b_{23}}{b_{22}} \\ 0 & 1 & \frac{b_{23}}{b_{22}} \\ 0 & 0 & b_{33} - b_{32} \cdot \frac{b_{23}}{b_{22}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b'_{11} - b_{12} \cdot \frac{b'_{21}}{b_{22}} & -b_{12} \cdot \frac{1}{b_{22}} & 0 \\ \frac{b'_{21}}{b_{22}} & \frac{1}{b_{22}} & 0 \\ b'_{31} - b_{32} \cdot \frac{b'_{21}}{b_{22}} & -b_{32} \cdot \frac{1}{b_{22}} & 1 \end{bmatrix}$$

Sustituyendo en la primera matriz por c 's y en la segunda por c' s, - se tiene :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & c_{13} \\ 0 & 1 & c_{23} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c'_{11} & c'_{12} & 0 \\ c'_{21} & c'_{22} & 0 \\ c'_{31} & c'_{32} & 1 \end{bmatrix}$$

Paso 3.

- Se divide el tercer renglón por c_{33} , tenemos :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & c_{13} \\ 0 & 1 & c_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c'_{11} & c'_{12} & 0 \\ c'_{21} & c'_{22} & 0 \\ \frac{c'_{31}}{c_{33}} & \frac{c'_{32}}{c_{33}} & \frac{1}{c_{33}} \end{bmatrix}$$

Se obtiene un nuevo primer renglón sumándole $-c_{13}$ x nuevo tercer renglón :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & c_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c'_{11} - c_{13} \cdot \frac{c'_{31}}{c_{33}} & c'_{12} - c_{13} \cdot \frac{c'_{32}}{c_{33}} & -c_{13} \cdot \frac{1}{c_{33}} \\ c'_{21} & c'_{22} & 0 \\ \frac{c'_{31}}{c_{33}} & \frac{c'_{32}}{c_{33}} & \frac{1}{c_{33}} \end{bmatrix}$$

Se obtiene un nuevo segundo renglón sumándole $-c_{23}$ x nuevo tercer renglón :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c'_{11} - c_{13} \cdot \frac{c'_{31}}{c_{33}} & c'_{12} - c_{13} \cdot \frac{c'_{32}}{c_{33}} & -c_{13} \cdot \frac{1}{c_{33}} \\ c'_{21} - c_{23} \cdot \frac{c'_{31}}{c_{33}} & c'_{22} - c_{23} \cdot \frac{c'_{32}}{c_{33}} & -c_{23} \cdot \frac{1}{c_{33}} \\ \frac{c'_{31}}{c_{33}} & \frac{c'_{32}}{c_{33}} & \frac{1}{c_{33}} \end{bmatrix}$$

Sustituyendo en la segunda matriz por d' se tiene:

$$\begin{bmatrix} d'_{11} & d'_{12} & d'_{13} \\ d'_{21} & d'_{22} & d'_{23} \\ d'_{31} & d'_{32} & d'_{33} \end{bmatrix} = D$$

Se ve entonces que la matriz inicial se ha transformado en la matriz idéntica y que se han aplicado las mismas operaciones, tanto a la matriz inicial como a la idéntica, obteniendo de ésta última a la matriz D.

La matriz D así obtenida es la inversa (A^{-1}) de A, lo cual se puede comprobar multiplicando ambas matrices.

Multiplicando ésta última por la matriz de constantes C, se obtienen los valores de las incógnitas X_1, X_2, \dots, X_n .

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina INVERS emplea un método basado en el de Gauss Jordan descrito anteriormente. Este método es una modificación que permitió hacer la subrutina de una manera fácil de entender y más eficiente en la búsqueda de la matriz inversa. INVERS efectúa el cálculo de la manera siguiente :

- Se escoge el elemento que en valor absoluto sea el más grande de la matriz.
- Si este elemento no está en la diagonal, se intercambian el renglón cuyo número sea el de la columna donde se encuentra el elemento y el renglón donde se encuentre el mismo, esta operación da como resultado una matriz equivalente a la inicial.
- Se hacen las operaciones correspondientes a uno de los pasos del método de Gauss Jordan, tal como se describieron anteriormente, pero el renglón que se divide es aquel donde se encuentre el elemento más grande, antes mencionado. Igualmente, los elementos por los que se multiplica este renglón para restarlo de cada uno de los otros y obtener los nuevos renglones, son los elementos de la columna donde se haya encontrado el elemento mayor.

De esta manera, si la columna es la k -ésima, se obtendrán ceros en esa columna menos en el lugar k , k , donde habrá un 1.

Este procedimiento se repite tantas veces como sea el orden de la matriz. Un hecho importante es que en la búsqueda de los nuevos elementos mayores en valor absoluto, no se toman en cuenta los renglones donde se tenga ya un 1 en la diagonal principal. En las búsquedas de estos máximos tampoco se toma en cuenta el valor 1 que pudiera tener un elemento dado de la matriz. En este caso, aunque el 1 sea el elemento más grande y se pudiera obtener directamente un 1 en la diagonal principal al intercambiar el renglón donde se encuentre, la eficiencia de la subrutina disminuiría mucho debido a que precisamente se van obteniendo unos (en la diagonal principal) y al ir avanzando en el cálculo se probarían muchos casos que de antemano se sabe, no pueden conducir a un intercambio de renglones.

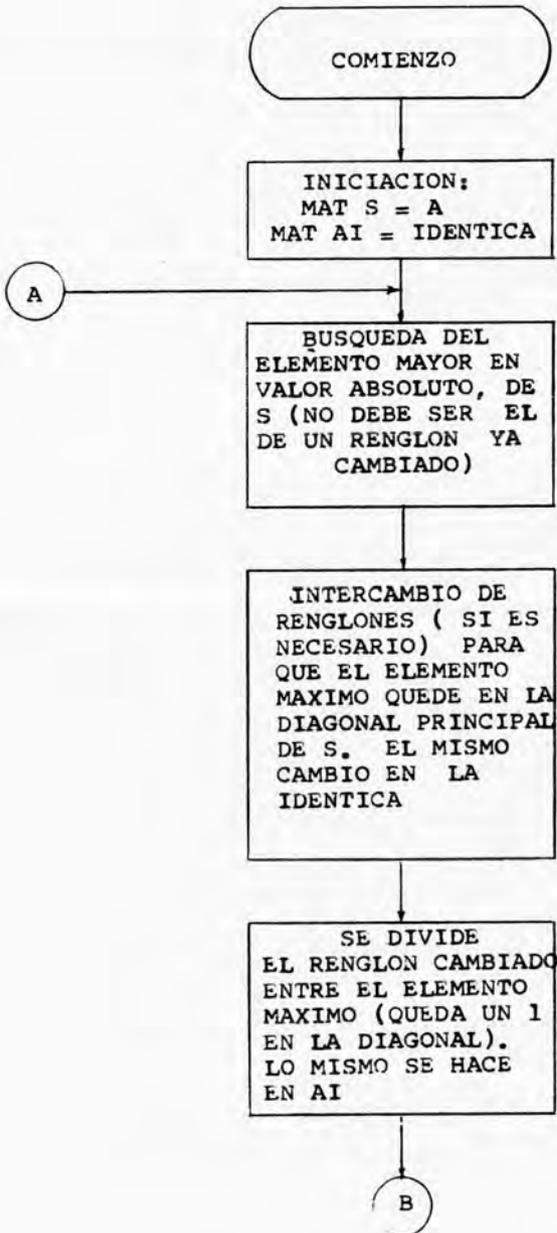
Los parámetros que requiere la subrutina INVERS son :

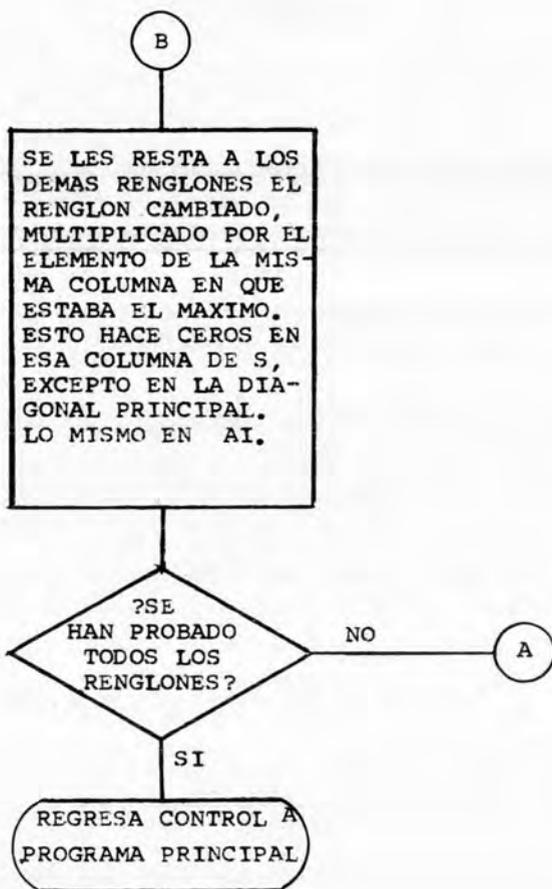
A : Que es la matriz que se va a invertir.

NG : Que es el orden de la matriz.

INVERS regresará al programa principal la matriz inversa de A, A^{-1} .

La subrutina puede invertir matrices hasta de 6 x 6 pero esto se puede ampliar si se aumentan las dimensiones.

SUBROUTINA DE INVERSION DE MATRICES
DIAGRAMA DE BLOQUES



EJEMPLO DE CALCULO.

Para ejemplificar de una manera rápida y objetiva el empleo de la subrutina INVERS, se escogió una matriz sencilla de 3 x 3 :

3	6	9
2	3	7
1	2	11

Para poder invertir esta matriz, se hizo un programa que lee los valores, los manda a la subrutina en A e imprime el resultado obtenido en AI. Este programa también llama a la subrutina MULT, cuya función es multiplicar matrices (en su lista de parámetros A y B son las matrices que se van a multiplicar, P es el producto obtenido, NR es número de renglones de A, N es el número de renglones de B y NC es el número de columnas de B). En este caso se empleó la subrutina MULT para multiplicar la matriz inicial y su inversa obtenida de INVERS, el resultado es la idéntica la cual imprime también el programa principal.

En las siguientes páginas se encontrará un diagrama de flujo de INVERS, un listado del programa principal de INVERS y de MULT, así como los resultados obtenidos para este ejemplo.

ES*RIUJLQ(1).INVERSMAIN

```

1      1 FORMAT ( )
2      DIMENSION A(6,6),AI(6,6),AINV(6,6)
3      READ(5,1) ((A(I,J),I=1,6),J=1,6)
4      CALL INVERS (A, AINV, 3)
5      CALL MULT (A, AINV, AI, 3, 3, 3)
6      PRINT 2, ((A(I,J),J=1,3),I=1,3),((AI(I,J),J=1,3),I=1,3),((AINV(I,
7      /),J=1,3),I=1,3)
8      2 FORMAT('1',16(/),60X,'MATRIZ INICIAL',//,3(54X,3F7.1,/)//,59
9      /X,'MATRIZ IDENTICA',//,3(54X,3F7.1,/)//,60X,'MATRIZ INVERSA'
10     /,//,3(54X,3F7.3,/)
11     STOP
12     ENJ

```

ES*RIUJL(1).INVERS

```

1      SUBROUTINE INVERS (A, AI, NG)
2      DIMENSION A(6,6), AI(6,6), S(6,6), KK(6)
3      DO 1 J=1, NG
4      KK(J) = 0
5      AI(J,J) = 1.0
6      DO 1 I=1, NG
7      IF (1.NE.J) AI(I,J) = 0.0
8      1 S(I,J) = A(I,J)
9      DO 9 L=1, NG
10     SM = 0.0
11     DO 4 N=1, NG
12     DO 4 M=1, NG
13     IF (S(M,N) .EQ. 1.0) GO TO 4
14     IF (ABS(SM) - ABS(S(M,N))) 2, 4, 4
15     2 DO 3 J=1, NG
16     3 IF (KK(J).EQ.M) GO TO 4
17     SM = S(M,N)
18     I = M
19     K = N
20     4 CONTINUE
21     KK(L) = K
22     IF (1.EQ.K) GO TO 6
23     DO 5 N=1, NG
24     P = AI(I,N)
25     AI(I,N) = AI(K,N)
26     AI(K,N) = P
27     P = S(I,N)
28     S(I,N) = S(K,N)
29     5 S(K,N) = P
30     6 P = S(K,K)
31     DO 7 J=1, NG
32     AI(K,J) = AI(K,J)/P
33     7 S(K,J) = S(K,J)/P
34     DO 9 I=1, NG
35     IF (1.EQ.K) GO TO 9
36     P = S(I,K)
37     DO 8 J=1, NG
38     AI(I,J) = AI(I,J) - P*AI(K,J)
39     8 S(I,J) = S(I,J) - P*S(K,J)
40     9 CONTINUE
41     RETURN
42     ENJ

```

ES*RI0JLQ(1).MULT

```
1  SUBROUTINE MULT (A, B, P, NR, N, NC)
2  DIMENSION A(6*6), B(6*6), P(6*6)
3  DO 1 J=1, NC
4  DO 1 I=1, NR
5  P(I,J) = 0.0
6  DO 1 K=1, N
7  1 P(I,J) = P(I,J) + A(I,K)*B(K,J)
8  RETURN
9  END
```

. MATRIZ INICIAL

3.0	6.0	9.0
2.0	3.0	7.0
1.0	2.0	11.0

. MATRIZ IDENTICA

1.0	.0	.0
.0	1.0	.0
.0	.0	1.0

. MATRIZ INVERSA

-.792	2.000	-.625
.625	-1.000	.125
-.042	.000	.125

CAPITULO XXI

A J U S T E

En ingeniería química muchas veces es necesario tener en forma analítica las funciones que relacionan dos o más variables con el fin de que los cálculos sean más rápidos; un problema se puede resolver más fácilmente por computadora si para ello se dispone de ecuaciones que correlacionen las diferentes variables en vez de valores que se puedan tomar como aproximaciones o entre los cuales se tenga que interpolar, es decir, una tabla de datos experimentales.

DESCRIPCION DEL PROBLEMA.

Para poder obtener una o varias ecuaciones a partir de estas tablas de datos experimentales, es necesario llevar a cabo un estudio de regresión. Uno de los métodos más empleados para hacer este estudio es el de mínimos cuadrados. Este método se desarrolla a continuación y se aplica el ajuste de varios tipos de curvas para una tabla de valores obtenidos experimentalmente o de una gráfica.

El programa de ajuste que se presenta en este capítulo emplea el método de mínimos cuadrados y puede ajustar curvas de tipo potencial, exponencial, hiperbólico y polinomial.

MODELO MATEMATICO.

METODO DE MINIMOS CUADRADOS.

para desarrollar el método de mínimos cuadrados, supóngase que se tiene un conjunto de parejas ordenadas $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots$

(X_n, Y_n) donde las X son valores escogidos de una variable cualquiera y las Y son valores observados, correspondientes a esas X. El objetivo es entonces encontrar una función que represente de manera adecuada estas parejas; para esto se propone una función :

$$Y = f(X)$$

y se requiere que la función :

$$E = \sum_{i=1}^n (f(X_i) - Y_i)^2$$

donde n es el número de parejas ordenadas, sea un mínimo; en otras palabras, que :

$$E' = 0$$

METODOS DE SOLUCION.

Se analiza ahora con detalle el método para cada uno de los tipos de funciones que ajusta el programa AJUSTE.

AJUSTE POTENCIAL.

La función propuesta en este caso es :

$$Y = A \cdot X^B$$

tomando logaritmos, se tiene :

$$\ln Y = \ln A + B \cdot \ln X$$

La función E se transforma entonces en :

$$E = \sum_{i=1}^n (\ln A + B \cdot \ln X_i - \ln Y_i)^2$$

Las incógnitas en esta ecuación son los coeficientes $\ln A$ y B, los --

cuales se determinan haciendo las derivadas parciales de E con respecto a cada uno de ellos iguales a cero, es decir :

$$\frac{\partial E}{\partial \ln A} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (\ln A + B \cdot \ln X_i - \ln Y_i) = 0$$

y

$$\frac{\partial E}{\partial B} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (\ln A + B \cdot \ln X_i - \ln Y_i) \cdot \ln X_i = 0$$

Estas dos últimas constituyen un sistema de ecuaciones simultáneas -cuyas incógnitas son $\ln A$ y B .

Expresadas en forma matricial, se tiene :

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n \ln X_i \\ \sum_{i=1}^n \ln X_i & \sum_{i=1}^n \ln^2 X_i \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \ln A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \ln Y_i \\ \sum_{i=1}^n \ln X_i \cdot \ln Y_i \end{bmatrix}$$

Esta ecuación matricial se puede resolver de varias maneras. El programa la resuelve analíticamente empleando determinantes.

AJUSTE EXPONENCIAL.

La función propuesta para este ajuste es :

$$Y = A \cdot \text{EXP}(B \cdot X)$$

tomando nuevamente logaritmos, se tiene :

$$\ln Y = \ln A + B \cdot X$$

La función E adquiere entonces la forma :

$$E = \sum_{i=1}^n (\ln A + B \cdot X_i - \ln Y_i)^2$$

Las incógnitas de esta ecuación son otra vez $\ln A$ y B . Derivando E con respecto a cada una de ellas, se tiene :

$$\frac{\partial E}{\partial \ln A} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (\ln A + B \cdot X_i - \ln Y_i) = 0$$

y

$$\frac{\partial E}{\partial B} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (\ln A + B \cdot X_i - \ln Y_i) \cdot X_i = 0$$

Expresando nuevamente este sistema en forma matricial, se tiene :

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \ln A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \ln Y_i \\ \sum_{i=1}^n \ln Y_i \cdot X_i \end{bmatrix}$$

El programa también resuelve esta ecuación matricial por medio de determinantes.

AJUSTE HIPERBOLICO.

En este caso se tiene :

$$Y = \frac{A + B \cdot X}{C + D \cdot X}$$

Para facilitar el cálculo se supone arbitrariamente $C = 1$.

En este caso se define una función E de una manera diferente :

$$\text{sea } H_i = A + BX_i - DX_i Y_i - Y_i$$

en cada uno de los puntos (X, Y) se trata de encontrar los valores de A , B y D tales que cada una de las H_i sea lo más cercana posible a cero. Se define entonces una función E tal que :

$$E = \sum_{i=1}^n H_i^2 = \sum_{i=1}^n (A + BX_i - DX_i Y_i - Y_i)^2$$

Esta función debe minimizarse; por lo tanto se tiene :

$$\frac{\partial E}{\partial A} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (A + BX_i - DX_i Y_i - Y_i) = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial B} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (A + BX_i - DX_i Y_i - Y_i) \cdot X_i = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial D} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (A + BX_i - DX_i Y_i - Y_i) \cdot X_i Y_i = 0$$

En notación matricial se llega en este caso a una matriz de coeficientes 3 por 3 :

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n X_i & -\sum_{i=1}^n X_i Y_i \\ \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 & -\sum_{i=1}^n X_i^2 Y_i \\ \sum_{i=1}^n X_i Y_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 Y_i & -\sum_{i=1}^n X_i^2 Y_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n Y_i X_i \\ \sum_{i=1}^n X_i Y_i^2 \end{bmatrix}$$

Para resolver esta ecuación matricial se prefirió multiplicar ambos miembros por la inversa de la matriz de coeficientes. El programa efectúa este cálculo llamando a una subrutina de inversión de matri-

ces, la cual se trató en un capítulo anterior.

AJUSTE POLINOMIAL.

El programa ajusta polinomios del grado 1 al grado 4. Por lo tanto se da el tratamiento para un polinomio de grado m :

$$\text{sea } Y = a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + \dots + a_m X^m$$

La función de error E queda definida como :

$$E = \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 X_i + a_2 X_i^2 + \dots + a_m X_i^m - Y_i)^2$$

derivando esta ecuación con respecto a cada uno de los coeficientes $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$ se obtiene el sistema :

$$\frac{\partial E}{\partial a_0} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 X_i + a_2 X_i^2 + \dots + a_m X_i^m - Y_i) = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_1} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 X_i + a_2 X_i^2 + \dots + a_m X_i^m - Y_i) \cdot X_i = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_2} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 X_i + a_2 X_i^2 + \dots + a_m X_i^m - Y_i) \cdot X_i^2 = 0$$

.....

$$\frac{\partial E}{\partial a_m} = 2 \cdot \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 X_i + a_2 X_i^2 + \dots + a_m X_i^m - Y_i) \cdot X_i^m = 0$$

Escribiendo este sistema en notación matricial se tiene :

$$\begin{bmatrix}
 n & \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 & \dots & \sum_{i=1}^n X_i^m \\
 \sum_{i=1}^n X_i & \sum_{i=1}^n X_i^2 & \sum_{i=1}^n X_i^3 & \dots & \sum_{i=1}^n X_i^{m+1} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \sum_{i=1}^n X_i^m & \sum_{i=1}^n X_i^{m+1} & \sum_{i=1}^n X_i^{m+2} & \dots & \sum_{i=1}^n X_i^{2m}
 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n Y_i \\ \sum_{i=1}^n X_i Y_i \\ \dots \\ \sum_{i=1}^n X_i^m Y_i \end{bmatrix}$$

El programa emplea la misma subrutina de inversión de matrices para resolver los sistemas para los 4 polinomios que ajusta. Las matrices, tanto la de coeficientes, como la de términos independientes, se calculan una sola vez en el programa.

De las siete funciones que se ajustan se escoge la mejor en base al error estándar. El error estándar se define como :

$$ES = \sqrt{\frac{E}{n}}$$

En el caso de los ajustes potencial, exponencial y polinomial de primer grado, el programa calcula también un coeficiente de correlación. Este último es una medida de la linealidad de los puntos (X, Y). La función que represente a este conjunto de puntos será lineal si y sólo si el coeficiente de correlación es igual a 1.

El coeficiente de correlación se define como :

$$r^2 = \frac{\left[\sum_{i=1}^n X_i Y_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \sum_{i=1}^n Y_i \right]^2}{\left[\sum_{i=1}^n X_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n X_i \right)^2 \right] \left[\sum_{i=1}^n Y_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n Y_i \right)^2 \right]}$$

En el ajuste potencial se considera la linealidad entre el $\ln(X)$ y el $\ln(Y)$, y en el exponencial se considera entre X y el $\ln(Y)$, modificándose la forma del coeficiente de correlación según corresponda.

DESCRIPCION DEL PROGRAMA.

El programa que se presenta en este capítulo puede hacer la correlación de hasta cien pares de valores, aceptando un número indefinido de juegos de datos.

El primer paso en el cálculo de las correlaciones es la obtención de las sumatorias para los ajustes potencial, exponencial e hiperbólico. Debido a que en los primeros se requiere tomar logaritmos, sólo se pueden correlacionar valores positivos. Este inconveniente puede salvarse multiplicando o sumando a los valores una constante, de manera de tener sólo números positivos. La constante deberá eliminarse después de la correlación, algebraicamente.

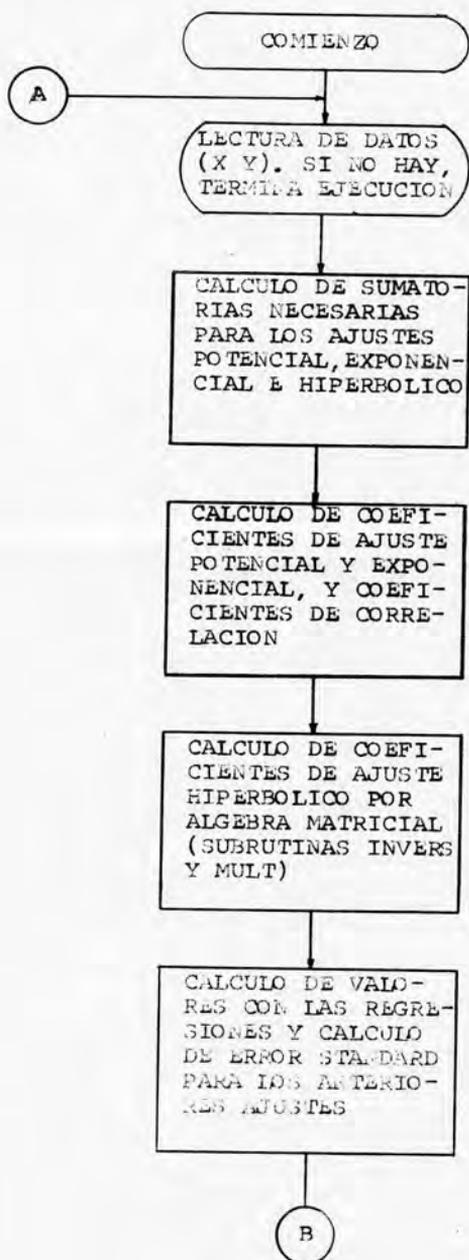
Los dos primeros sistemas de ecuaciones formados se resuelven por determinantes y el tercero, por inversión y multiplicación de matrices.

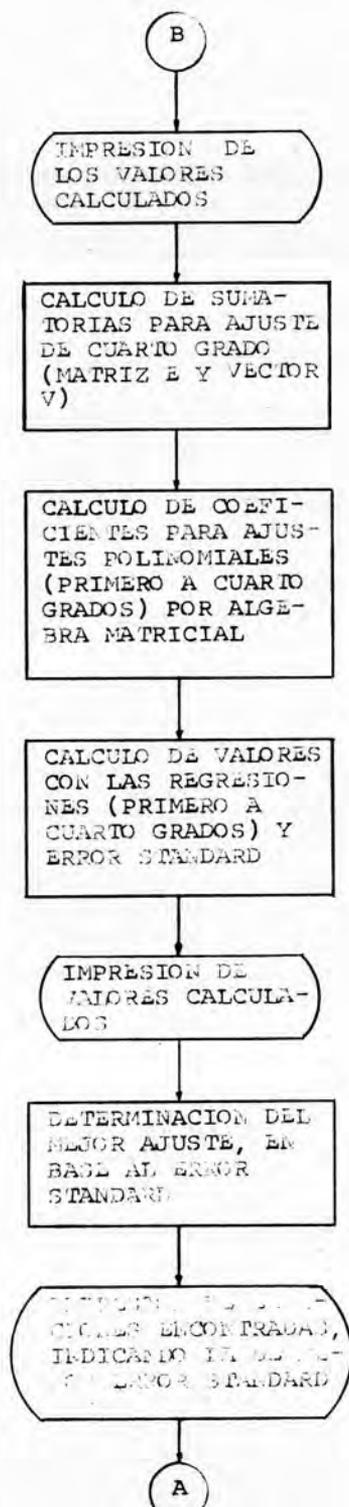
A continuación se evalúan las sumatorias requeridas para la ecuación de cuarto grado. El sistema matricial resultante se resuelve para los grados del primero al cuarto, variando únicamente, para ello, el orden de las matrices al ejecutar las subrutinas INVERS y MULT (Capítulo XX).

Es evidente que una forma rápida de modificar el alcance del programa

ma es aplicar funciones (por ejemplo, logaritmo natural) a las parejas de valores que se va a correlacionar, obteniéndose ecuaciones tal vez más precisas. Esta modificación es fácil y hace prácticamente innecesario añadir al programa otro tipo de correlaciones. La función aplicada dependerá de la tendencia observada en los datos y deberá tenerse en cuenta al emplear la correlación.

PROGRAMA DE AJUSTE
POR MÍNIMOS CUADRADOS
DIAGRAMA DE BLOQUES





ENTRADA DE DATOS.

La manera de dar los datos al programa AJUSTE es relativamente sencilla :

En la primera tarjeta se codifica un título de la curva que se va a correlacionar, con una especificación de campo de 16 A 5.

En la segunda tarjeta y las subsecuentes que sean necesarias se codifican, en formato libre :

- El número de puntos que se tenga.
- Los valores de las parejas variables independiente - variable dependiente, hasta completar el número de puntos.

En el caso en el que se quieran correlacionar dos o más curvas, nada más se vuelve a comenzar por el título.

RESULTADOS.

El programa imprimirá los siguientes resultados :

- El título que se dió para la curva que se esté correlacionando.
- En una primera tabla :
 - . El número del punto.
 - . El valor de la variable independiente.
 - . El valor de la variable dependiente.
 - . El valor obtenido por el ajuste potencial.

- . El valor obtenido por el ajuste exponencial.
- . El valor obtenido por el ajuste hiperbólico.

- En una segunda tabla :
 - . El valor de la variable independiente.
 - . El valor de la variable dependiente.
 - . En orden, los valores obtenidos por cada uno de los ajustes polinomiales, del primero al cuarto grado.

Después, el programa imprimirá, para cada uno de los ajustes, en el orden :

- Potencial.
- Exponencial.
- Hiperbólico.
- Polinomial de primer grado.
- Polinomial de segundo grado.
- Polinomial de tercer grado.
- Polinomial de cuarto grado.

La ecuación obtenida, el error standard y el coeficiente de correlación para los ajustes potencial, exponencial y polinomial de primer grado.

AJUSTE imprimirá "MEJOR AJUSTE" arriba de la correlación que ha ya dado menor error standard.

NOMENCLATURA DEL PROGRAMA

A J U S T E

- AUXC : Matriz auxiliar en la inversión.
- AUXV : Vector en el que se guardan todos los coeficientes de las ecuaciones encontradas.
- D : Determinante del sistema en el potencial y exponencial.
- E : Matriz general de coeficientes de los sistemas de ecuaciones.
- ES : Vector de errores standard.
- INDEX : Indice del mejor ajuste.
- I1, I2, I3 : Indices auxiliares en la inversión e impresión.
- M, M1 : Vectores auxiliares para controlar iteraciones.
- NP : Número total de parejas.
- P : Matriz de coeficientes del sistema de ajuste potencial.
- R : Vector de coeficientes de correlación.
- SY1 : Sumatoria de variables dependientes al cuadrado.
- SY2 : Sumatoria de logaritmos al cuadrado de variables dependientes.
- TITULO : Identificación de la curva.
- V : Vector de términos independientes en los sistemas de ecuaciones.

EJEMPLO DE CALCULO.

El programa AJUSTE se empleó para resolver problemas que se encontraron en los capítulos de las Secciones I y II de esta tesis :

- Se correlacionaron datos para obtener los coeficientes de algunos polinomios para el cálculo de la conductividad térmica (subrutina CONDUCT, Sección I, Capítulo VI).
- Se obtuvieron las ecuaciones para las funciones FTEMP y FHV (Subrutina ECVAP, Sección I, Capítulo VII y programa PSICRO, Sección I, Capítulo X).
- Se correlacionaron los polinomios cuyos coeficientes aparecen en la proposición DATA de la subrutina EQUIL 2 para calcular constantes de equilibrio líquido-vapor. (Programa MATRIX, Sección II, Capítulo XV).

Sin embargo, no es posible presentar todos estos resultados aquí y se escogió como ejemplo las correlaciones hechas para obtener las funciones FTEMP y FHV.

Estas correlaciones fueron hechas con datos tomados de las tablas publicadas por Othmer (3) para la presión de vapor y el calor latente de vaporización en función de la temperatura.

Los valores que se correlacionaron, como se dijo anteriormente, apa

recen en las tablas de resultados en las cuales la variable independiente es la temperatura, en grados Fahrenheit y las variables dependientes son, respectivamente, la presión de vapor, en mm de Hg y el calor latente de vaporización, en BTU/lb mol.

Para la presión de vapor, se obtuvo un ajuste hiperbólico y para el calor latente de vaporización un polinomio del cuarto grado. Cada uno de los ajustes da un error de menos del 1.5 % con respecto a las tablas de Othmer.

En las páginas que siguen aparecen un listado del programa AJUSTE, los resultados obtenidos por cada una de las correlaciones para los ejemplos que se acaban de describir y las ecuaciones finales para las funciones FTEMP y FHV.

ES*RIEDEL(1),ADJUSTE

```

1 1 FORMAT(///,56X,'AJUSTE POLINOMIAL',//,16X,'X',20X,'Y',15X,'PRIMER
2 2 10X,'BA', 'SEGUNDO GRADO',9X,'TERCER GRADO',9X,'CUARTO GRADO',/)
3 2 FORMAT('1',26X,16A5,///,56X,'VALORES CALCULADOS',//,16X,'X',20X
4 4 10X,'BA', 'POTENCIAL',11X,'EXPONENCIAL',10X,'HIPERBOLICA',/)
5 3 FORMAT('1',26X,16A5,///,54X,'E C I I A C I O N E S :',//)
6 4 FORMAT(9X,'EXPONENCIAL: Y = ',1PE14.8,'*EXP(',E14.8,'*X)')
7 5 FORMAT(9X,'HIPERBOLICA: Y = (',1PE14.8,' + ',E14.8,'*X)/(1.0 + ',E
8 8 14.8,'*X)')
9 5 FORMAT(9X,'GRADO',12,': Y = ',1PE14.8,' + ',E14.8,'*X')
10 7 FORMAT('0',21X,'ERROR STANDARD:',1PE10.4,' COEFICIENTE DE CORRELA
11 11 -CIJN:',UPFB.5,///)
12 8 FORMAT('0',24X,'+',1PE15.8,'*X***',I1)
13 7 FORMAT('0',21X,'ERROR STANDARD:',1PE10.4,///)
14 10 FORMAT(9X,'POTENCIAL: Y = ',1PE14.8,'*X***',E14.8)
15 11 FORMAT(16A5)
16 12 FORMAT( )
17 13 FORMAT(1X,I3,6(6X,1PE15.3))
18 31 FORMAT(3X,'*** MEJOR AJUSTE: ***',/)
19 DIMENSION AUXC(6*6), AUXV(21), TITULO(16), M(4), M1(4), R(3)
20 DIMENSION E(6,6), P(2,2), X(50), Y(50), YC(4), ES(7), V(5)
21 DATA M/ 1, 3, 6, 10/, M1/ 2, 5, 9, 14/
22 14 READ (6, 11, END=30) TITULO
23 READ 12, NP, (X(I), Y(I), I=1, NP)
24 DO 15 I=1,2
25 DO 15 J=1, I
26 E(I,J) = 0.0
27 P(I,J) = 0.0
28 DO 33 I=1, 21
29 AUXV(I) = 0.0
30 DO 16 I=1,3
31 E(J,I) = 0.0
32 SY1 = 0.0
33 SY2 = 0.0
34 DO 17 I=1, NP
35 Y1 = ALOG(Y(I))
36 X1 = ALOG(X(I))
37 AUXV(17) = AUXV(17) + Y1
38 AUXV(18) = AUXV(18) + X(I)*Y1
39 AUXV(19) = AUXV(19) + X1*Y1
40 AUXV(17) = AUXV(19) + Y(I)
41 AUXV(21) = AUXV(21) + X(I)*Y(I)*Y(I)
42 P(2,1) = P(2,1) + X1
43 P(2,2) = P(2,2) + X1*X1
44 E(2,1) = E(2,1) + X(I)
45 E(3,1) = E(3,1) + X(I)*Y(I)
46 E(2,2) = E(2,2) + X(I)*X(I)
47 E(3,2) = E(3,2) + X(I)*X(I)*Y(I)
48 E(3,3) = E(3,3) - X(I)*X(I)*Y(I)*Y(I)
49 SY1 = SY1 + Y(I)*Y(I)
50 17 SY2 = SY2 + Y1*Y1
51 P(1,2) = P(2,1)
52 E(1,2) = E(2,1)
53 E(1,3) = -E(3,1)
54 E(2,3) = -E(3,2)
55 AUXV(15) = AUXV(17)
56 AUXV(20) = E(3,1)
57 E(1,1) = NP
58 P(1,1) = NP
59 R(1) = (AUXV(16)-P(2,1)*AUXV(17)/NP)**2/((P(2,2)-P(2,1)*P(2,1)/NP
60 -*(SY2-AUXV(17)*AUXV(17)/NP))

```

```

51 R(2) = (AUXV(16)-E(2,1)*AUXV(17)/NP)**2/((E(2,2)-E(2,1)*E(2,1)/NP
52 -*(SY1-AUXV(17)*AUXV(17)/NP))
53 R(3) = (E(3,1)-E(2,1)*AUXV(19)/NP)**2/((E(2,2)-E(2,1)*E(2,1)/NP)
54 -*(SY1-AUXV(19)*AUXV(19)/NP))
55 V1 = AUXV(17)
56 J = NP*E(2,2) - E(2,1)*E(2,1)
57 AUXV(17) = (E(2,2)*V1 - E(1,2)*AUXV(18))/D
58 AUXV(18) = (E(1,1)*AUXV(18) - E(2,1)*V1)/D
59 V1 = AUXV(18)
60 J = NP*P(2,2) - P(2,1)*P(2,1)
61 AUXV(15) = (P(2,2)*V1 - P(1,2)*AUXV(16))/D
62 AUXV(16) = (P(1,1)*AUXV(16) - P(2,1)*V1)/D
63 DO 35 I=1, 3
64 V(1) = AUXV(15+I)
65 CALL INVERS (E, AUXC, 3)
66 CALL MULT (AUXC, V, AUXV(19), 3, 3, 1)
67 AUXV(17) = EXP(AUXV(17))
68 AUXV(18) = EXP(AUXV(18))
69 DO 32 I=1, 7
70 ES(I) = 0.0
71 PRINT 2, TITULO
72 DO 18 I=1, NP
73 YC(1) = AUXV(15)*X(I)**AJXV(16)
74 YC(2) = AUXV(17)*EXP(AUXV(18))*X(I)
75 YC(3) = (AUXV(19) + AUXV(20)*X(I))/(1.0 + AUXV(21)*X(I))
76 PRINT 13, I, X(I), Y(I), YC(1), YC(2), YC(3)
77 DO 18 J=1, 3
78 ES(J) = ES(J) + (Y(I) - YC(J))**2
79 DO 34 J = 1, 3
80 ES(J) = SORT(ES(J)/NP)
81 DO 19 I=1, 5
82 V(I) = 0.0
83 DO 19 J=1, 5
84 E(I,J) = 0.0
85 DO 20 K=1, NP
86 DO 20 J=1, 5
87 V(J) = V(J) + Y(K)*X(K)**(J-1)
88 DO 20 I=1, J
89 E(I,J) = E(I,J) + X(K)**(I+J-2)
90 DO 21 J=1, 4
91 N1 = J+1
92 DO 21 I=N1, 5
93 E(I,J) = E(J,I)
94 PRINT 1
95 DO 24 N=2, 5
96 I1 = N(N-1)
97 CALL INVERS (E, AUXC, N)
98 CALL MULT (AUXC, V, AUXV(I1), N, N, 1)
99 DO 26 I=1, NP
100 YC(1) = AUXV(2)*X(1)+AUXV(1)
101 YC(2) = (AUXV(5)*X(1)+AUXV(4))*X(1)+AUXV(3)
102 YC(3) = ((AUXV(9)*X(1)+AJXV(8))*X(1)+AUXV(7))*X(1)+AUXV(6)
103 YC(4) = (((AUXV(14)*X(1)+AUXV(13))*X(1)+AUXV(12))*X(1)+AUXV(11))*
104 -X(1)+AJXV(10)
105 DO 25 J=1, 4
106 ES(J+3) = ES(J+3) + (Y(I) - YC(J))**2
107 PRINT 13, I, X(I), Y(I), YC
108 DO 27 I=4, 7
109 ES(I) = SORT(ES(I)/NP)
110 INDEX = 7
111 S = ES(7)

```

```

122      DO 35 I=1, 6
123      IF(ES(I) .GT. 5) GO TO 35
124      INJEX = I
125      S = ES(I)
126      35 CONTINUE
127      PRINT 3, TITULO
128      IF(INDEX .EQ. 1) PRINT 31
129      PRINT 10, AUXV(15), AUXV(16)
130      PRINT 7, ES(1), R(1)
131      IF(INDEX .EQ. 2) PRINT 31
132      PRINT 4, AUXV(17), AUXV(18)
133      PRINT 7, ES(2), R(2)
134      IF(INDEX .EQ. 3) PRINT 31
135      PRINT 5, AUXV(19), AUXV(20), AUXV(21)
136      PRINT 9, ES(3)
137      IF(INDEX .EQ. 4) PRINT 31
138      PRINT 6, M(1), AUXV(1), AUXV(2)
139      PRINT 7, ES(4), R(3)
140      DO 29 I=2, 4
141      IF(INDEX .EQ. I+3) PRINT 31
142      I1 = M(I)
143      I2 = I1 + 2
144      I3 = M1(I)
145      PRINT 6, I, AUXV(I1), AUXV(I1 + 1)
146      K = 2
147      DO 28 J=I2, I3
148      PRINT 8, AUXV(J), K
149      28 K = K + 1
150      29 PRINT 9, ES(I+3)
151      GO TO 14
152      30 STOP
153      END

```

PRESION DE VAPOR CONTRA TEMPERATURA

VALORES CALCULADOS

	X	Y	POTENCIAL	EXPONENCIAL	HIPERBOLICA
1	3.20000000+01	6.60800003-01	7.76864126-01	1.47145252+00	6.60512954-01
2	5.00000000+01	9.64000002-01	1.04325855+00	1.54081963+00	9.64712456-01
3	6.80000000+01	1.24330001+00	1.27824533+00	1.61345682+00	1.24476737+00
4	8.60000000+01	1.50120001+00	1.49277185+00	1.68951826+00	1.50344254+00
5	1.04000000+02	1.74140000+00	1.69246608+00	1.76916538+00	1.74309619+00
6	1.22000000+02	1.96520001+00	1.88070382+00	1.85256724+00	1.96575202+00
7	1.40000000+02	2.17340001+00	2.05971044+00	1.93990082+00	2.17315647+00
8	1.58000000+02	2.36829999+00	2.23105052+00	2.03135145+00	2.36682472+00
9	1.76000000+02	2.54040000+00	2.39587674+00	2.12711325+00	2.54807755+00
10	1.94000000+02	2.72080001+00	2.55506921+00	2.22738945+00	2.71807185+00
11	2.12000000+02	2.88060001+00	2.70931920+00	2.33239287+00	2.87782493+00
12	2.30000000+02	3.03119999+00	2.85918218+00	2.44234633+00	3.02823523+00
13	2.48000000+02	3.17899999+00	3.00511283+00	2.55748323+00	3.17009905+00
14	2.66000000+02	3.30660000+00	3.14748946+00	2.67804790+00	3.30412468+00
15	2.84000000+02	3.43290001+00	3.28663099+00	2.80429620+00	3.43094426+00
16	3.02000000+02	3.55250001+00	3.42280948+00	2.93649611+00	3.55112377+00
17	3.20000000+02	3.66569999+00	3.55625939+00	3.07492816+00	3.66517138+00
18	3.38000000+02	3.77360001+00	3.68718457+00	3.21988621+00	3.77354473+00
19	3.56000000+02	3.87590000+00	3.81576362+00	3.37167782+00	3.87665698+00
20	3.74000000+02	3.97330001+00	3.94215423+00	3.53062516+00	3.97488222+00
21	3.92000000+02	4.06620002+00	4.06649643+00	3.69706559+00	4.06855977+00
22	4.10000000+02	4.28160000+00	4.36918002+00	4.14830828+00	4.28481686+00
23	4.28000000+02	4.47469997+00	4.66144788+00	4.65462697+00	4.47867978+00
24	4.46000000+02	4.64950001+00	4.94458592+00	5.22274405+00	4.65334731+00
25	4.64000000+02	4.80909997+00	5.21962577+00	5.86020231+00	4.81163436+00
26	4.82000000+02	4.95630002+00	5.48741150+00	6.57546502+00	4.95571208+00
27	5.00000000+02	5.09350002+00	5.74864393+00	7.37802857+00	5.09741164+00

AJUSTE POLINOMIAL

	X	Y	PRIMER GRADO	SEGUNDO GRADO	TERCER GRADO	CUARTO GRADO
1	3.20000000+01	6.60800003-01	1.39877099+00	8.39745790-01	6.99236006-01	6.60488042-01
2	5.00000000+01	9.64000002-01	1.52194583+00	1.06504767+00	9.76053588-01	9.64726021-01
3	6.80000000+01	1.24330001+00	1.64512068+00	1.28400517+00	1.23844449+00	1.24518455+00
4	8.60000000+01	1.50120001+00	1.76829553+00	1.49661827+00	1.48691577+00	1.50465114+00
5	1.04000000+02	1.74140000+00	1.89147039+00	1.70288697+00	1.72197837+00	1.74687798+00
6	1.22000000+02	1.96520001+00	2.01464522+00	1.90281127+00	1.94412736+00	1.96142876+00
7	1.40000000+02	2.17340001+00	2.13782007+00	2.09639117+00	2.15388157+00	2.17125694+00
8	1.58000000+02	2.36829999+00	2.26099491+00	2.28362671+00	2.35174432+00	2.36700905+00
9	1.76000000+02	2.54040000+00	2.38416979+00	2.46451783+00	2.53822237+00	2.54080520+00
10	1.94000000+02	2.72080001+00	2.50734463+00	2.63906450+00	2.71382278+00	2.72263874+00
11	2.12000000+02	2.88060001+00	2.63051948+00	2.80726689+00	2.87905261+00	2.88557675+00
12	2.30000000+02	3.03119999+00	2.75369433+00	2.96912485+00	3.03441876+00	3.03455455+00
13	2.48000000+02	3.17899999+00	2.87686917+00	3.12463938+00	3.18042833+00	3.17640090+00
14	2.66000000+02	3.30660000+00	3.00004402+00	3.27380756+00	3.31758833+00	3.30986810+00
15	2.84000000+02	3.43290001+00	3.12321886+00	3.41663299+00	3.44640562+00	3.43568200+00
16	3.02000000+02	3.55250001+00	3.24639371+00	3.55311267+00	3.56738737+00	3.54845167+00
17	3.20000000+02	3.66569999+00	3.36956859+00	3.68324864+00	3.68104053+00	3.66609979+00
18	3.38000000+02	3.77360001+00	3.49274343+00	3.80704021+00	3.78787114+00	3.77317243+00
19	3.56000000+02	3.87590000+00	3.61591828+00	3.92448738+00	3.88938088+00	3.87518043+00
20	3.74000000+02	3.97330001+00	3.73909312+00	4.03559017+00	3.98308451+00	3.97191784+00

21	3.92000000+02	4.06620002+00	3.86226797+00	4.14034855+00	4.07250726+00	4.06434011+00
22	4.37000000+02	4.28160000+00	4.17020506+00	4.37448782+00	4.27616656+00	4.27403175+00
23	4.82000000+02	4.47469997+00	4.47814220+00	4.56897461+00	4.45778787+00	4.47404587+00
24	5.27000000+02	4.64950001+00	4.78607935+00	4.72380888+00	4.62529325+00	4.64246177+00
25	5.72000000+02	4.80909997+00	5.09401643+00	4.83899075+00	4.78660476+00	4.81554013+00
26	6.17000000+02	4.95630002+00	5.40195358+00	4.91452020+00	4.94964415+00	4.96272131+00
27	6.62000000+02	5.09350002+00	5.70989072+00	4.95039707+00	5.12233353+00	5.09163564+00

E C U A C I O N E S :

POTENCIAL: $Y = 7.86991799-02 * X ** 6.60648361-01$
 ERROR STANDARD: 2.1917-01, COEFICIENTE DE CORRELACION: .98504

EXPONENCIAL: $Y = 1.35575384+00 * \text{EXP}(2.55913724-03 * X)$
 ERROR STANDARD: 7.3354-01, COEFICIENTE DE CORRELACION: .76033

**** MEJOR AJUSTE: ****

HIPERBOLICA: $Y = (4.95834351-02 + 2.08046436-02 * X) / (1.0 + 2.59358436-03 * X)$
 ERROR STANDARD: 3.2251-03

GRADO 1: $Y = 1.17979348+00 + 6.84304722-03 * X$
 ERROR STANDARD: 3.1812-01, COEFICIENTE DE CORRELACION: .93330

GRADO 2: $Y = 4.23543930-01 + 1.33196115-02 * X$
 $+ -9.79073229-06 * X ** 2$
 ERROR STANDARD: 7.3953-02

GRADO 3: $Y = 1.69918060-01 + 1.73083246-02 * X$
 $+ -2.44367402-05 * X ** 2$
 $+ 1.44891601-08 * X ** 3$
 ERROR STANDARD: 1.6018-02

GRADO 4: $Y = 9.28878784-02 + 1.90978050-02 * X$
 $+ -3.55541706-05 * X ** 2$
 $+ 3.95903044-08 * X ** 3$
 $+ -1.84758875-11 * X ** 4$
 ERROR STANDARD: 3.9264-03

CALOR LATENTE DE VAPORIZACION CONTRA TEMPERATURA

VALORES CALCULADOS

	X	Y	POTENCIAL	EXPONENCIAL	HIPERBOLICA
1	3.20000000+01	1.92900000+04	2.44498750+04	2.14224714+04	1.91897590+04
2	5.00000000+01	1.91200000+04	2.20574617+04	2.09457498+04	1.90478308+04
3	6.80000000+01	1.89500000+04	2.05467627+04	2.04796367+04	1.89009343+04
4	8.60000000+01	1.87800000+04	1.94630466+04	2.00238965+04	1.87488032+04
5	1.04000000+02	1.86000000+04	1.86280383+04	1.95782979+04	1.85911531+04
6	1.22000000+02	1.84110000+04	1.79544065+04	1.91426150+04	1.84276780+04
7	1.40000000+02	1.82300000+04	1.73932373+04	1.87166279+04	1.82580491+04
8	1.58000000+02	1.80400000+04	1.69145374+04	1.83001204+04	1.80819119+04
9	1.76000000+02	1.78500000+04	1.64986682+04	1.78928816+04	1.78988853+04
10	1.94000000+02	1.76500000+04	1.61321152+04	1.74947051+04	1.77085559+04
11	2.12000000+02	1.74500000+04	1.58052050+04	1.71053894+04	1.75104788+04
12	2.30000000+02	1.72500000+04	1.55170914+04	1.67247373+04	1.73041702+04
13	2.48000000+02	1.70300000+04	1.52434551+04	1.63525562+04	1.70891069+04
14	2.66000000+02	1.68000000+04	1.49989948+04	1.59886571+04	1.68647147+04
15	2.84000000+02	1.65700000+04	1.47740920+04	1.56328560+04	1.66303867+04
16	3.02000000+02	1.63300000+04	1.45660836+04	1.52849728+04	1.63854341+04
17	3.20000000+02	1.60900000+04	1.43728011+04	1.49448309+04	1.61291226+04
18	3.38000000+02	1.58300000+04	1.41924574+04	1.46122584+04	1.58606429+04
19	3.56000000+02	1.55700000+04	1.40235631+04	1.42870869+04	1.55791080+04
20	3.74000000+02	1.53000000+04	1.38648652+04	1.39691515+04	1.52835413+04
21	3.92000000+02	1.50300000+04	1.37153002+04	1.36582911+04	1.49728676+04
22	4.10000000+02	1.42100000+04	1.33756724+04	1.29110692+04	1.41219684+04
23	4.28000000+02	1.32800000+04	1.30765837+04	1.22047268+04	1.31464102+04
24	5.27000000+02	1.21700000+04	1.28100309+04	1.15370271+04	1.20166329+04
25	5.72000000+02	1.08600000+04	1.25701184+04	1.09058560+04	1.06929291+04
26	6.17000000+02	9.20000000+03	1.23523812+04	1.03092153+04	9.12067088+03
27	6.62000000+02	6.90000000+03	1.21533627+04	9.74521582+03	7.22262836+03

AJUSTE POLINOMIAL

	X	Y	PRIMER GRADO	SEGUNDO GRADO	TERCER GRADO	CUARTO GRADO
1	3.20000000+01	1.92900000+04	2.02895342+04	1.89334124+04	1.94166536+04	1.92523137+04
2	5.00000000+01	1.91200000+04	1.99835830+04	1.88752075+04	1.91812581+04	1.91143645+04
3	6.80000000+01	1.89500000+04	1.96776316+04	1.88016121+04	1.89582700+04	1.89620247+04
4	8.60000000+01	1.87800000+04	1.93716802+04	1.87126260+04	1.87459453+04	1.87074785+04
5	1.04000000+02	1.86000000+04	1.90657288+04	1.86082495+04	1.85425403+04	1.86226584+04
6	1.22000000+02	1.84110000+04	1.87597773+04	1.84884822+04	1.83463113+04	1.84332448+04
7	1.40000000+02	1.82300000+04	1.84538259+04	1.83533222+04	1.81555146+04	1.82496655+04
8	1.58000000+02	1.80400000+04	1.81478745+04	1.82027756+04	1.79684062+04	1.80520879+04
9	1.76000000+02	1.78500000+04	1.78419231+04	1.80368364+04	1.77832244+04	1.78506654+04
10	1.94000000+02	1.76500000+04	1.75359719+04	1.78555066+04	1.76982798+04	1.76444419+04
11	2.12000000+02	1.74500000+04	1.72300205+04	1.76587861+04	1.74117739+04	1.74344469+04
12	2.30000000+02	1.72500000+04	1.69240691+04	1.74466750+04	1.72219817+04	1.72206488+04
13	2.48000000+02	1.70300000+04	1.66181177+04	1.72191733+04	1.70271687+04	1.70029651+04
14	2.66000000+02	1.68000000+04	1.63121663+04	1.69762810+04	1.68255618+04	1.67810598+04
15	2.84000000+02	1.65700000+04	1.60062148+04	1.67179980+04	1.66154468+04	1.65543457+04
16	3.02000000+02	1.63300000+04	1.57002634+04	1.64443245+04	1.63950701+04	1.63210439+04
17	3.20000000+02	1.60900000+04	1.53943120+04	1.61552600+04	1.61626877+04	1.60828828+04
18	3.38000000+02	1.58300000+04	1.50883608+04	1.58508052+04	1.59165562+04	1.58356492+04
19	3.56000000+02	1.55700000+04	1.47824094+04	1.55309597+04	1.56494931+04	1.55788384+04
20	3.74000000+02	1.53000000+04	1.44764580+04	1.51957236+04	1.53760701+04	1.53104529+04

21	3.92000000+02	1.50300000+04	1.41705066+04	1.48450967+04	1.50782280+04	1.50284454+04
22	4.37000000+02	1.42100000+04	1.34056282+04	1.39011958+04	1.42391392+04	1.42477678+04
23	4.82000000+02	1.32800000+04	1.26407498+04	1.28611033+04	1.32432766+04	1.33229360+04
24	5.27000000+02	1.21700000+04	1.18758711+04	1.17248196+04	1.20633936+04	1.22004422+04
25	5.72000000+02	1.08600000+04	1.11109927+04	1.04923442+04	1.06722441+04	1.08170462+04
26	6.17000000+02	9.20000000+03	1.03461143+04	9.16367749+03	9.04258130+03	9.04962645+03
27	6.62000000+02	6.90000000+03	9.58123584+03	7.73881934+03	7.14715918+03	6.96508105+03

E C U A C I O N E S :

POTENCIAL: $Y = 5.43960996+04*X**-2.30735224-01$

ERROR STANDARD: 2.0772+03, COEFICIENTE DE CORRELACION: .55874

EXPONENCIAL: $Y = 2.22969248+04*EXP(-1.25026026-03*X)$

ERROR STANDARD: 1.1822+03, COEFICIENTE DE CORRELACION: .84390

HIPERBOLICA: $Y = (1.94305684+04 + -2.50290527+01*X)/(1.0 + -9.12141055-04*X)$

ERROR STANDARD: 9.4643+01

GRADO 1: $Y = 2.08334478+04 + -1.69972992+01*X$

ERROR STANDARD: 7.9567+02, COEFICIENTE DE CORRELACION: .93243

GRADO 2: $Y = 1.69988857+04 + -1.28601837+00*X$

$$+ -2.37509757-02*X**2$$

ERROR STANDARD: 2.6409+02

GRADO 3: $Y = 1.98711914+04 + -1.50051880+01*X$

$$+ 2.66220570-02*X**2$$

$$+ -4.98334412-05*X**3$$

ERROR STANDARD: 8.9919+01

**** MEJOR AJUSTE: ****

GRADO 4: $Y = 1.94542969+04 + -5.32226563+00*X$

$$+ -3.35786727-02*X**2$$

$$+ 8.60244036-05*X**3$$

$$+ -1.00008037-07*X**4$$

CAPITULO XXII

SUBROUTINA INTERP
INTERPOLACION POLINOMIAL.

La subrutina que se presenta a continuación es capaz de efectuar interpolaciones entre diferentes puntos de un conjunto dado; la subrutina está basada en un método numérico conocido como Interpolación Polinomial o Interpolación Lagrangiana, ya que el método está fundamentado en los polinomios de Lagrange.

Esta subrutina es de gran importancia ya que complementa el ajuste de curvas presentado anteriormente; es decir, en el caso de que no sea posible encontrar un ajuste adecuado para una determinada curva, siempre queda la posibilidad de hacer una interpolación entre los diferentes puntos que se tengan; la interpolación será mucho más precisa mientras mayor sea el grado del polinomio que se emplee para llevarla a cabo. La Interpolación Lagrangiana calcula valores interpolados por medio de un polinomio de grado $n-1$ si se tienen n puntos. Por lo tanto, mientras más grande sea el número de puntos, se podrá obtener una mejor interpolación.

POLINOMIOS DE LAGRANGE.

Los polinomios de Lagrange son de la forma :

$$L_k(x_i) = 0 \quad \text{Si } i \neq k \quad 1)$$

$$L_k(x_i) = 1 \quad \text{Si } i = k \quad 2)$$

De esta manera, un polinomio de la forma :

$$Y = a_0 + a_1x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$$

puede escribirse como :

$$\begin{aligned} P_n(x) &= L_0(x) \cdot y_0 + L_1(x) \cdot y_1 + \dots + L_n(x) \cdot y_n \\ &= \sum_{k=0}^n L_k(x) y_k \end{aligned}$$

La ecuación 1 requiere que cualquier factor $x - x_i$ pueda dividir a $L_k(x)$ y por lo tanto se tiene :

$$\begin{aligned} L_k(x) &= \alpha \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_{k-1}) \cdot (x - x_{k+1}) \cdot \dots \\ &\dots \cdot (x - x_n) \end{aligned} \quad 3)$$

donde el término $x - x_k$ no se encuentra entre los factores.

Como $L_k(x_k) = 1$, se tiene :

$$\alpha = \frac{1}{(x_k - x_0) \cdot (x_k - x_1) \cdot \dots \cdot (x_k - x_{k-1}) \cdot (x_k - x_{k+1}) \cdot \dots \cdot (x_k - x_n)} \quad 4)$$

y sustituyendo α en 3), se tiene :

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_{k-1}) \cdot (x - x_{k+1}) \cdot \dots \cdot (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdot (x_k - x_1) \cdot \dots \cdot (x_k - x_{k-1}) \cdot (x_k - x_{k+1}) \cdot \dots \cdot (x_k - x_n)}$$

de 3) se ve también que :

A)

$$L_k(x) = \frac{\alpha (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n)}{(x - x_k)} \quad 5)$$

si :

$$F_{n+1}(x) = (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n)$$

$$L_k(x_k) = \lim_{x \rightarrow x_k} \frac{\alpha \cdot F_{n+1}(x)}{x - x_k} = \lim_{x \rightarrow x_k} \alpha \frac{d/dx(F_{n+1}(x))}{d/dx(x - x_k)}$$

$$= \frac{\alpha F'_{n+1}(x_k)}{1}$$

como :

$$L_k(x_k) = 1, \quad \alpha = \frac{1}{F'_{n+1}(x_k)}$$

sustituyendo en 5 se tiene :

$$L_k(x) = \frac{1}{F'_{n+1}(x_k)} \cdot \frac{F_{n+1}(x)}{x - x_k} = \frac{G_k(x)}{F'_{n+1}(x_k)} \quad 6)$$

donde :

$$G_k(x) = \frac{F_{n+1}(x)}{x - x_k} \quad 7)$$

Así pues, se puede construir un polinomio de Lagrange siguiendo la secuencia :

- 1.- Establecer una función, $F_{n+1}(x) = (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n)$
- 2.- Encontrar la derivada de esta función y establecer esta derivada para cada uno de los puntos que se tengan.
- 3.- Empleando la ecuación 7 se encuentra la función $G_k(x)$ para cada uno de los puntos que se tengan.
- 4.- Finalmente se establecen los polinomios de Lagrange empleando la ecuación 6.

Para poder llevar a cabo la interpolación por medio de una computadora se emplea la ecuación A anterior y se establece la fórmula :

$$L_k(x) = \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

$$Y \quad P_n(x) = \sum_{k=0}^n \left[\prod_{i=0, i \neq k}^n \left(\frac{x - x_i}{x_k - x_i} \right) \right] \cdot Y_k$$

Resolviendo esta ecuación se encuentra el polinomio $P(x)$ de grado n que pase por los $n+1$ puntos que se tengan; este polinomio es el que se emplea en la interpolación y de esta manera se pueden obtener valores muy aproximados para la variable dependiente, con un valor de la variable independiente. Como se dijo anteriormente, la interpolación será más precisa mientras mayor sea el número de puntos de que se disponga.

DESCRIPCION DE LA SUBRUTINA.

La subrutina calcula valores interpolados por el método de los polinomios de Lagrange empleando las ecuaciones descritas anteriormente.

La subrutina es capaz de interpolar un número de valores cualquiera; es decir, es capaz de llevar a cabo el número de interpolaciones que se deseen.

La subrutina INTERP requiere de los siguientes parámetros para poder llevar a cabo el cálculo :

- NP : Número de puntos que se dan para llevar a cabo la interpolación (corresponden a un polinomio de grado NP-1).
- NV : Número de valores que se quieren interpolar.
- X : Vector de valores de la variable independiente.
- Y : Vector de valores de la variable dependiente.
- XI : Vector de valores de la variable independiente para los cuales se quiere obtener un valor interpolado.

RESULTADOS.

La subrutina INTERP dará como resultados los valores interpolados para cada uno de los valores del vector XI; estos resultados los guarda en el vector YI.

La subrutina imprimirá en forma de tabla los valores de la variable independiente y los valores correspondientes de la variable dependiente que se le haya dado para llevar a cabo la interpolación.

Después de esto, la subrutina imprimirá los valores de la variable independiente para los que se quiera obtener un valor interpolado así como los valores interpolados correspondientes.

La subrutina regresará al programa principal el vector YI de valores interpolados.

EJEMPLO DE CALCULO.

Para ilustrar el empleo de la subrutina INTERP, se hizo un pequeño programa de datos que llamara a la subrutina.

Los valores de las variables independientes y dependientes se dan en una proposición DATA en los vectores X y Y.

Se desean obtener seis valores interpolados y los valores de la variable independiente se dan en una proposición DATA en el vector XI.

Más adelante aparece un listado de este pequeño programa y un listado de la subrutina, así como los resultados obtenidos para el ejemplo anterior.

Una subrutina para interpolar es de un gran valor para un ingeniero químico y por lo mismo se presenta ésta última basada en los polinomios de Lagrange, método que, sin dejar de ser sencillo, puede dar una gran exactitud.

B6700/07700 F L O T A T I O N C O M P I L A T I O N T A B L E 2.7.081

```

DIMENSION X(10),Y(10),XT(6),YT(4)
DATA NP/10/,MV/6/, V/0.1,0.2,0.7,1.0,1.2,1.5,1.6,1.3,2.0,2.4/,
/Y/0.9003,0.777,0.3790,0.1990,0.1091,0.0158,0.0050,0.0376,
/W/0.0563,0.0664/, XT/0.0,0.6,0.0,1.4,1.7,1.9/
CALL INTERP (NP,MV,Y,Y,XT,YT)
STOP
L'0

```

```

SUBROUTINE INTERP (NP, NV, X, Y, XI, Y1)
DIMENSION X(NP), Y(NP), XI(NV), Y1(NV)
REAL LAGRAP
WRITE (6,5) NP, NV

DO 7 K=1, NP
7 WRITE (6,6) X(K), Y(K)
WRITE (6,8)
DO 3 N=1, NV
Y1(N) = 0.0
DO 2 J=1, NP
LAGRAP = 1.0
DO 1 I=1, NP
IF (I .EQ. J) GO TO 1
LAGRAP = (XI(N) - X(I))*LAGRAP/(X(J) - X(I))
1 CONTINUE
2 Y1(N) = LAGRAP*Y(J) + Y1(N)
3 WRITE (6,4) XI(N), Y1(N)
4 FORMAT (15X, 1PE15.7, 20X, 1PE15.7)
5 FORMAT (20X, 'INTERPOLACION LAGRANGIANA POLINOMIAL', //, X, 'NUMERO D
'E PUNTOS = ', 2X, I3, T43, 'NUMERO DE VALORES INTERPOLADOS = ', 2X, I3, /
-/ , 12X, 'VARIABLE INDEPENDIENTE', 14X, 'VARIABLE DEPENDIENTE', //)
6 FORMAT(15X, 1PE15.7, 20X, 1PE15.7)
8 FORMAT (30X, 'VALORES INTERPOLADOS', //, 22X, 'VI.', 32X, 'VP. ')
RETURN
END

```

INTERPOLACION LAGRANGIANA POLINOMIAL

NUMERO DE PUNTOS = 10

NUMERO DE VALORES INTERPOLADOS =

6

VARIABLE INDEPENDIENTE

VARIABLE DEPENDIENTE

1.0000000E-01
 3.0000000E-01
 7.0000000E-01
 1.0000000E+00
 1.5000000E+00
 1.5000000E+00
 1.6000000E+00
 1.8000000E+00
 2.0000000E+00
 2.0000000E+00

9.0030000E-01
 7.0770000E-01
 3.7980000E-01
 1.9880000E-01
 1.0910000E-01
 1.5800000E-02
 -5.9000000E-03
 -3.7600000E-02
 -5.6300000E-02
 -6.6900000E-02

VALORES INTERPOLADOS

VI.
 4.0000000E-01
 6.0000000E-01
 9.0000000E-01
 1.0000000E+00
 1.0000000E+00
 1.0000000E+00

VP.
 6.1698545E-01
 4.5273265E-01
 2.5282253E-01
 4.1921462E-02
 -2.3573848E-02
 -4.8366015E-02

CAPITULO XXIII

SUBROUTINA MULLER.

El método de Muller que se presenta en este capítulo también es un método de solución de ecuaciones y complementa los métodos de Newton-Raphson y de Regula-Falsi presentados anteriormente. Se presenta hasta ahora, ya que está basado en los polinomios de Lagrange descritos en el capítulo anterior, el cual trata de la interpolación polinomial. El método de Muller que se presenta ahora es muy preciso y converge un número muy pequeño de iteraciones. Se analizarán ahora las ecuaciones en las que está basado y la manera en las que se resuelven para poder encontrar la raíz de una ecuación.

METODO DE SOLUCION.

Supóngase que se quiere encontrar la raíz de la ecuación $f(x) = 0$. Para lograrlo, se escogen tres parejas de valores $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$ y con estos tres puntos se establece el polinomio de interpolación de Lagrange del segundo orden :

La ecuación para el polinomio de interpolación de orden n está dado por :

$$\sum_{k=0}^n L_k(X) \cdot f(X_k) \quad 1)$$

como se vió en el capítulo anterior.

En este caso, n es igual a 3 y se tiene :

$$f(x) = L_0(X) \cdot f(x_0) + L_1(X) \cdot f(x_1) + L_2(X) \cdot f(x_2) \quad 2)$$

donde :

$$L_0(X) = \alpha_0 \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_2)$$

$$L_1(X) = \alpha_1 \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_2)$$

$$L_2(X) = \alpha_2 \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_1) \quad 3)$$

y :

$$\alpha_0 = \frac{1}{(x_0 - x_1) \cdot (x_0 - x_2)}$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{(x_1 - x_0) \cdot (x_1 - x_2)}$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{(x_2 - x_0) \cdot (x_2 - x_1)} \quad 4)$$

así pues se tiene :

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{(x - x_1) \cdot (x - x_2)}{(x_0 - x_1) \cdot (x_0 - x_2)} \cdot f(x_0) + \\ &+ \frac{(x - x_0) \cdot (x - x_2)}{(x_1 - x_0) \cdot (x_1 - x_2)} \cdot f(x_1) + \\ &+ \frac{(x - x_0) \cdot (x - x_1)}{(x_2 - x_0) \cdot (x_2 - x_1)} \cdot f(x_2) \quad 5) \end{aligned}$$

Esta última ecuación expresa a la función $f(x)$ en función de los tres puntos que se dieron y el lado derecho representa un polinomio del segundo grado, cuyos coeficientes se pueden calcular en función de estos puntos.

El método consiste entonces en encontrar el polinomio del segundo grado, resolverlo para encontrar sus dos raíces, calcular la función $f(x)$ en cada una de ellas, escoger aquella para la cual el valor absoluto de $f(x)$ sea el menor, sustituir la primera pareja $(x_0, f(x_0))$ por ésta última y volver a comenzar estableciendo un nuevo polinomio del segundo grado con los tres puntos que queden. Este procedimiento se repite hasta que el valor absoluto de $f(x)$ sea suficientemente cercano a cero para alguno de los valores de las tercias que se van estableciendo.

Los coeficientes del polinomio de segundo grado se obtienen rearrreglando el lado derecho de la ecuación 5) y son :

$$a_0 = f(x_2) \cdot (x_0 - x_1) - f(x_0) \cdot (x_2 - x_1) - f(x_1) \cdot (x_0 - x_2) \quad 6)$$

$$a_1 = f(x_0) \cdot (x_2^2 - x_1^2) + f(x_1) \cdot (x_0^2 - x_2^2) - f(x_2) \cdot (x_0^2 - x_1^2) \quad 7)$$

$$a_2 = f(x_2) \cdot x_1 \cdot x_0 \cdot (x_0 - x_1) - f(x_0) \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot (x_2 - x_1) - f(x_1) \cdot x_0 \cdot x_2 \cdot (x_0 - x_2) \quad 8)$$

Siendo a_0 , a_1 y a_2 los coeficientes en la ecuación :

$$f(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 \quad 9)$$

Las raíces de esta ecuación se calculan con la fórmula clásica :

$$x' = \frac{-a_1 + \sqrt{a_1^2 - 4 a_0 a_2}}{2 \cdot a_2}$$

$$x'' = \frac{-a_1 - \sqrt{a_1^2 - 4 a_0 a_2}}{2 \cdot a_2}$$

10)

Al ir estableciendo polinomios del segundo orden con tercias de puntos, este método se aproxima a la raíz de la ecuación $f(x) = 0$ con mucha rapidez, en un número muy pequeño de iteraciones y con una gran precisión.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA.

La subrutina MULLER resuelve una ecuación encontrando su raíz en un intervalo que se haya dado o en uno relativamente cercano a éste, ya que está estructurada de la misma manera que la subrutina REGULA (Capítulo XVIII) y amplía el intervalo inicial hacia la izquierda y luego hacia la derecha, cada vez en un tamaño que se haya fijado. (Véase Descripción de la Subrutina, Capítulo XVIII).

MULLER también imprimirá un mensaje en el caso de no encontrar una raíz en el intervalo ampliado.

Como se vió anteriormente, el método requiere tres puntos; la subrutina requiere dos solamente y calcula el tercero como la media aritmética de éstos; la tolerancia para el valor de la función puede ser fijado arbitrariamente y se manda a la subrutina como un parámetro en la lista de argumentos; la tolerancia para la diferencia entre los valores de la raíz en dos iteraciones sucesivas está fija y es igual a una milésima.

Para el diagrama de bloques de la subrutina MULLER también véase el de la subrutina REGULA.

Los parámetros que requiere la subrutina son :

&n : Donde n es el número de una etiqueta.

Esta etiqueta debe proveerse en la unidad de programa que -

llame a la subrutina MULLER para el caso en el que és ta no encuentre una raíz en el intervalo ampliado y que por lo tanto regrese el control por medio de un RETURN no standard.

SS : Nombre de la función, la cual se tuvo que haber hecho externa en la unidad de programa que llame a la subrutina MULLER.

VAL 11 : Límite inferior del intervalo.

VAL 33 : Límite superior del intervalo.

VINCR : Valor en el que se desea ampliar el intervalo en cada iteración.

TOL : Tolerancia para el valor de la función.

y regresa al programa principal.

RAIZ : Valor de la raíz de la función.

NOMENCLATURA DE LA SUBROUTINA

M U L L E R

- AM : Coeficiente de grado dos en el polinomio de segundo grado propuesto por la subrutina.
- BM : Coeficiente de grado uno en el polinomio de segundo grado propuesto por la subrutina.
- CM : Coeficiente de grado cero en el polinomio de segundo grado propuesto por la subrutina.
- DIF1 : Diferencia entre los valores inferior y superior del intervalo de la variable independiente.
- DIF2 : Diferencia entre los valores inferior e intermedio del intervalo de la variable independiente.
- DIF3 : Diferencia entre los valores superior e intermedio del intervalo de la variable independiente.
- SQ : Raiz del discriminante del polinomio de segundo grado propuesto por la subrutina
- SSI : Variable auxiliar en el ordenamiento de los valores de la variable independiente y de la función.
- SS1 : Valor de la función en el límite inferior del intervalo.
- SS2 : Valor de la función en el valor intermedio del intervalo.

- SS3 : Valor de la función en el límite superior del intervalo.
- SS4 : Valor de la función en la raíz encontrada.
- VAL1 : Límite inferior del intervalo de la variable independiente.
- VAL2 : Valor intermedio del intervalo de la variable independiente.
- VAL3 : Límite superior del intervalo.
- V1 : Valor en el cual se amplía el intervalo, en el caso de no encontrarse una raíz en el intervalo inicial.

EJEMPLO DE CALCULO.

Como ejemplo para ilustrar el empleo de la subrutina MULLER se tomó nuevamente el cálculo del factor de compresibilidad mediante la ecuación de Redlich-Kwong, como se hizo en los ejemplos de las subrutinas REGULA (Capítulo XVIII) y NEWTON (Capítulo XIX). Se empleó también la misma mezcla de hidrocarburos.

En los resultados también aparece una hoja con el número de iteraciones y los valores del factor de compresibilidad (variable independiente) y de la función en cada una de ellas.

El programa principal para este ejemplo es el mismo que el empleado para los ejemplos de las dos subrutinas REGULA y NEWTON, pero con la proposición CALL cambiada para la subrutina MULLER.

En las páginas siguientes aparece el listado de la subrutina y los resultados obtenidos para el ejemplo que se acaba de mencionar.

ES*RIJULQ(1).RKMAIN/M

```

1   DIMENSION Y(8), PC(8), TC(8), TIT(8), A(8), B(8)
2   COMMON /BLOCK1/ AC, BC, P, NEV
3   DATA TIT/'HIDROG','ACSULF','METANO','ETANO','PROPAN','IBUTAN','NBU
4   -TAN','NPENTA'/
5   EXTERNAL RK
6   READ 7, NCOMP, T, P, Y, PC, TC
7   FORMAT ( )
8   AC = 0.0
9   BC = 0.0
10  DO 1 I=1, NCOMP
11  A(I) = SQRT(0.4278*(TC(I)/T)**2.5/PC(I))
12  B(I) = 0.0867*TC(I)/(PC(I)*T)
13  AC = AC + A(I)*Y(I)
14  BC = BC + B(I)*Y(I)
15  PRINT 6
16  CALL MULLER(N8, RK, 0.9, 1.1, 0.018, Z, 1E-5)
17  PRINT 3
18  DO 2 I=1, NCOMP
19  PRINT 4, TIT(I), TC(I), PC(I), Y(I)
20  PRINT 5, Z
21  3 FORMAT ('1',///,37X,'COMPONENTE',5X,'TEMP.CRIT.',5X,'PRESION CRIT.',
22  -,5X,'COMPOSICION',///)
23  4 FORMAT (39X,A6,9X,F6.2,11X,F5.2,12X,F6.4,/)
24  5 FORMAT (49X,'FACTOR DE COMPRESIBILIDAD = ',F6.4)
25  6 FORMAT ('1',///,57X,'PROCESO ITERATIVO:',/,34X,'EVALUACION',5X,'FAC
26  -TOR DE COMPRESIBILIDAD',5X,'RESULTADO DE LA R. K.',///)
27  STOP
28  END

```

ES*RI0JL0(1).MULLER

```

1 SUBROUTINE MULLER(*,SS,VAL1,VAL3,VINCR,RAIZ,TOL)
2 FORMAT('J',14X,'NO HAY RAICES EN EL INTERVALO ',2(1PE0.2,1X))
3 V1 = VINCR
4 VAL1 = VAL1
5 VAL3 = VAL3
6 K = 1
7 SSI = 0.0
8 SS3 = SS(VAL3)
9 IF(ABS(SS3).LT.TOL) GO TO 11
10 2 SS1 = SS(VAL1)
11 IF(ABS(SS1).LT.TOL) GO TO 12
12 IF(SS1*SS3.LT.0.0) GO TO 4
13 IF(V1.EQ.0.0) GO TO 15
14 K = K + 1
15 SSI = SS1
16 IF(K.GT.100) GO TO 14
17 IF(K.EQ.51) GO TO 3
18 VAL1 = VAL1 - V1
19 GO TO 2
20 3 V1 = -V1
21 VAL1 = VAL3 - V1
22 GO TO 2
23 4 IF(SSI.EQ.0.0) GO TO 5
24 VAL3 = VAL1 + V1
25 SS3 = SSI
26 5 VAL2 = (VAL1 + VAL3)*0.5
27 SS2 = SS(VAL2)
28 IF(ABS(SS2).LE.TOL) GO TO 13
29 IF(VAL3.GT.VAL1) GO TO 6
30 SSI = SS1
31 SS1 = SS3
32 SS3 = SSI
33 SSI = VAL1
34 VAL1 = VAL3
35 VAL3 = SSI
36 6 DIF1 = VAL1 - VAL3
37 DIF2 = VAL1 - VAL2
38 DIF3 = VAL3 - VAL2
39 AM = SS3*DIF2 - SS1*DIF3 - SS2*DIF1
40 BM = SS1*DIF3*(VAL3 + VAL2) + SS2*DIF1*(VAL3 + VAL1) - SS3*DIF2*
41 / (VAL2 + VAL1)
42 CM = SS3*VAL2*VAL1*DIF2 - SS1*VAL2*VAL3*DIF3 - SS2*VAL1*VAL3*DIF1
43 SQ = SQRT(BM*BM - 4.0*AM*CM)
44 7 RAIZ = (-BM + SQ)/(2.0*AM)
45 IF(RAIZ.GT.VAL1.AND.RAIZ.LT.VAL3) GO TO 8
46 SQ = -SQ
47 GO TO 7
48 8 IF(ABS((VAL2 - RAIZ)/RAIZ).LE.1E-3) RETURN
49 SS4 = SS(RAIZ)
50 IF(ABS(SS4).LT.TOL) RETURN
51 IF(RAIZ.LT.VAL2) GO TO 9
52 VAL1 = VAL2
53 SS1 = SS2
54 GO TO 10
55 9 VAL3 = VAL2
56 SS3 = SS2
57 10 SS2 = SS4
58 VAL2 = RAIZ
59 GO TO 5
60 11 RAIZ = VAL3

```

```
61          RETURN
62      12 RAIZ = VAL1
63          RETURN
64      13 RAIZ = VAL2
65          RETURN
66      14 VAL1 = VINCR*50.0
67          VAL3 = VAL33 + VAL1
68          VAL1 = VAL11 - VAL1
69      15 WRITE(6,1) VAL1, VAL3
70          RETURN 1
71          END
```

EVALUACION	PROCESO ITERATIVO: FACTOR DE COMPRESIBILIDAD	RESULTADO DE LA P. K.
1	1.1000	7.6419-02
2	.9000	-1.2536-01
3	1.0000	-4.4472-02
4	1.0408	-3.3990-04

COMPONENTE	TEMP.CRIT.	PRESION CRIT.	COMPOSICION
HIDROG	33.30	12.80	.5621
ACSULF	373.60	88.90	.1329
METANO	190.66	45.80	.1765
ETANO	305.26	48.80	.0544
PROPAN	369.96	42.00	.0132
IBUTAN	407.16	37.00	.0015
NBUTAN	426.16	36.00	.0014
NPENTA	470.36	33.00	.0580

FACTOR DE COMPRESIBILIDAD = 1.0411

CAPITULO XXIV

SUBROUTINA RUNGE 4
SOLUCION DE ECUACIONES DIFERENCIALES

Muchas veces en el cálculo de reactores, es indispensable resolver ecuaciones diferenciales, las cuales en general, no poseen solución analítica.

Los problemas que se presentan pueden ser de dos tipos : problemas con valores de frontera y problemas de valor inicial.

Un problema con valores de frontera, es aquél en el cual se dan las condiciones en dos o más puntos distintos, en tanto que un problema de valor inicial tiene todas las condiciones dadas en un solo punto.

METODO DE RUNGE-KUTTA.

Uno de los mejores métodos para resolver problemas del tipo de valor inicial es el de Runge-Kutta y es probablemente uno de los más usados; mediante él se puede obtener la solución tabulada para n ecuaciones diferenciales simultáneas del primer orden.

Debido a que una ecuación diferencial de orden n se puede transformar en un sistema de n ecuaciones simultáneas de primer orden, el método puede resolver ecuaciones de cualquier orden.

Supongamos entonces una ecuación diferencial de primer orden :

$$y' = f(x, y)$$

Teniendo un punto inicial (x_1, y_1) se trata de encontrar un punto y_2 correspondiente a $x_2 = x_1 + \Delta x$. Tomando como nuevo punto inicial el punto (x_2, y_2) se trata de encontrar el punto (x_3, y_3) siguiente. Continuando con este procedimiento se pueden encontrar todos los puntos que se deseen. La tabulación será más aproximada mientras menor sea el intervalo Δx que se tome.

Para obtener esta tabulación, el método de Runge-Kutta emplea las siguientes ecuaciones :

$$y_{n+1} = y_n + \Delta y_n$$

donde :

$$\Delta y_n = \frac{\Delta x}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

y donde :

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = f\left(x_n + \frac{\Delta x}{2}, y_n + \frac{k_1}{2} \cdot \Delta x\right)$$

$$k_3 = f\left(x_n + \frac{\Delta x}{2}, y_n + \frac{k_2}{2} \cdot \Delta x\right)$$

$$k_4 = f(x_n + \Delta x, y_n + k_3 \cdot \Delta x)$$

Ahora, si se tiene una ecuación diferencial de orden n , se puede descomponer en n ecuaciones simultáneas de orden 1 de la siguiente manera :

$$f_1 = y_1 = y$$

$$f_2 = y_2 = \frac{d y}{d x} = \frac{d y_1}{d x}$$

.....

$$f_n = y_n = \frac{d^{n-1} y}{d x^{n-1}} = \frac{d^{n-1} y_1}{d x^{n-1}}$$

De esta manera, dando condiciones iniciales para cada una de las y_i ($i = 1, \dots, n$) se puede hacer una tabulación para cada una de las derivadas, hasta la de orden $n-1$.

Si se tienen valores iniciales de la variable dependiente para las n ecuaciones de primer orden en $x - x_j$ el algoritmo para resolver la i -ésima ecuación es :

$$y_{i,j+1} = y_{i,j} + \Delta y_{i,j}$$

donde :

$$\Delta y_{i,j} = \frac{\Delta x}{6} (k_{i,1} + 2k_{i,1} + 2k_{i,2} + k_{i,3})$$

y donde :

$$k_{i,1} = f_i(x_j, y_{i,j})$$

$$k_{i,2} = f_i\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, y_{i,j} + \frac{k_{i,1}}{2} \cdot \Delta x\right)$$

$$k_{i,3} = f_i\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, y_{i,j} + \frac{k_{i,2}}{2} \cdot \Delta x\right)$$

$$k_{i,4} = f_i(x_j + \Delta x, y_{i,j} + k_{i,2} \cdot \Delta x)$$

Aplicando este último algoritmo a cada una de las n ecuaciones diferenciales, se puede obtener una tabulación de los valores calculados para cada una de ellas.

DESCRIPCION DE LA SUBROUTINA

La subrutina RUNGE 4 resuelve sistemas de hasta 4 ecuaciones diferenciales simultáneas, basándose en las ecuaciones descritas anteriormente. La subrutina procede dividiendo el intervalo en 100 partes y calculando los valores de las 4 ecuaciones para cada uno de los puntos del intervalo y guarda los valores de las variables, así como los obtenidos para cada una de las ecuaciones en arreglos.

DATOS REQUERIDOS.

La subrutina requiere de los siguientes parámetros para resolver las ecuaciones diferenciales :

- NF : Número de ecuaciones diferenciales simultáneas que se quieren resolver.
- X : X es el vector de los valores de la variable independiente. X (1) es el valor inicial de este arreglo, necesario para comenzar el proceso de solución; X (1) es uno de los límites del intervalo de solución.
- Y (1, I) : Y es una matriz de valores de las variables dependientes de las ecuaciones diferenciales; se pueden resolver n ecuaciones simultáneas. Y (1, I) con I = 1, n son las condiciones iniciales para cada una de ellas.
- XFINAL : Valor final del intervalo de solución.

RESULTADOS.

RUNGE 4 imprimirá en forma de tabla los valores de la variable in dependiente (100, ya que el intervalo se divide en 100 puntos) y los valores calculados correspondientes de cada una de las ecuaciones di ferenciales simultáneas que se hayan resuelto. Esta tabla representa un resultado numérico de las ecuaciones que se tienen; estos resultados son muy aproximados a los reales.

Si el sistema es de más de cuatro simultáneas, se requiere ampliar las dimensiones.

Consideramos esta subrutina de gran importancia ya que, como dijimos anteriormente, muchas veces se tienen problemas planteados me diante ecuaciones diferenciales, como por ejemplo, en los cálculos in volucrados en el diseño o en la simulación de reactores.

EJEMPLO DE CALCULO.

Para ilustrar el empleo de la subrutina RUNGE 4, se escogió un problema relacionado con un reactor de tipo batch y donde era necesario calcular el perfil de temperaturas y el de conversiones con respecto al tiempo. El problema es el siguiente :

En un reactor intermitente de 5 m^3 se lleva a cabo una reacción exotérmica



en fase líquida. La ecuación de velocidad de reacción es :

$$r = K \cdot C_a$$

donde :

$$K = 4 \cdot 10^6 \cdot \text{EXP} (-7900/T) \text{ seg}^{-1}$$

se tienen, además, los siguientes datos :

$$(\Delta H)_a = -1.67 \cdot 10^6 \text{ Joule/kg.}$$

$$C_p = 4 \cdot 2 \cdot 10^6 \text{ Joule/m}^3\text{°C.}$$

$$= \text{Calor/unidad de volumen.}$$

$$M_a = 100 \text{ Kg/Kg-mol.}$$

$$C_{a0} = 1 \text{ Kg mol/m}^3.$$

La temperatura inicial del reactor es de 20°C (293.16°K) y la máxima temperatura permisible es de 95°C . El reactor contiene una espiral para propósitos de transmisión de calor; su área de transferencia es de 3.3 m^2 y puede ser operado con vapor (120°C , $U = 1360 \text{ Watts/}$

$m^2\text{C}$) o con agua de enfriamiento (15°C , $U = 1180 \text{ Watts}/m^2\text{C}$).

La mezcla de reacción se precalienta a 55°C , se deja que la reacción proceda adiabáticamente, y se inicia el enfriamiento cuando se alcanzan 95°C o una conversión del 0.9. La temperatura final es de 45°C .

Dar el perfil de temperaturas y conversiones contra el tiempo.

SOLUCION DEL PROBLEMA.

El problema consta de tres partes :

1. - Fase de precalentamiento.
2. - Fase de reacción (reacción adiabática).
3. - Fase de enfriamiento.

Para cada una de estas fases se establecen ecuaciones diferenciales simultáneas, las cuales se resuelven por medio de la subrutina - - RUNGE 4.

1. - Fase de precalentamiento.

El balance de materia en un reactor está dado por :

Reactivo alimentado - reactivo que sale - reactivo convertido = reactivo acumulado en el reactor.

Puesto que se trata de un reactor intermitente, no hay corriente de entrada ni de salida, cancelándose los dos primeros términos.

El reactivo convertido en el reactor es.:

$$r \cdot V \cdot dt$$

donde :

r : es la velocidad de reacción.

V : es el volumen del reactor.

t : es el tiempo.

La acumulación del reactivo está dada por :

$$- m dx$$

donde :

m : es la masa de reactivo correspondiente a una conversión de cero, en moles.

x : es la conversión.

dx : es el cambio en la conversión en el intervalo dt.

Sustituyendo en el balance se obtiene :

$$m dx = r V dt$$

o

$$\frac{dx}{dt} = r \frac{V}{m}$$

Sustituyendo los datos :

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= 4 \cdot 10^6 \cdot e^{(-7900/T)} \cdot Ca \cdot \frac{V}{m} \\ &= 4 \cdot 10^6 \cdot e^{(-7900/T)} \cdot (1 - x) \cdot Ca_0 \cdot \frac{V}{M} \end{aligned}$$

o, puesto que $Ca_0 = m/V$

$$\frac{dx}{dt} = 4 \cdot 10^6 \cdot e^{(-7900/T)} \cdot (1 - x)$$

El balance de energía en un reactor está dado por :

$$\begin{aligned} & \text{Energía en la corriente alimentada.} \\ & - \text{Energía en la corriente de salida} \\ & + \text{Energía transferida al reactor} \\ & = \text{Acumulación de energía en el reactor.} \end{aligned}$$

En un reactor intermitente, los dos primeros términos se cancelan. La energía transferida al reactor, en este caso por medio de vapor, está dada por :

$$U_V \cdot A \cdot (T_V - T) \cdot dt$$

La energía acumulada es :

$$\Delta H_r \cdot V \cdot dt + m_t \cdot C_p \cdot dT$$

La ecuación de balance queda entonces :

$$m_t \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = - \Delta H_r \cdot V + U_V \cdot A \cdot (T_V - T)$$

y, puesto que en este caso $m = m_t = \rho \cdot V$, la ecuación de balance de energía se transforma en :

$$\frac{dT}{dt} = (- \Delta H_r \cdot V + U_V \cdot A \cdot (T_V - T)) / (\rho \cdot C_p \cdot V)$$

que por sustitución de los datos numéricos da : (Todas las temperaturas se trabajan en ° K).

$$\frac{dT}{dt} = 1.5904761 \cdot 10^6 \cdot (1 - x) \cdot e^{(-7900/T)} \\ + 2.1371428 \cdot 10^{-4} \cdot (393.16 - T)$$

Las ecuaciones de balance (dx/dt y dT/dt) se resolvieron simultáneamente por medio de la subrutina RUNGE 4. Los listados del programa y de la subrutina se dan mas adelante; así como los resultados obtenidos.

2. - Reacción Adiabática.

El balance de materia para este caso es igual al del caso anterior :

$$\frac{dx}{dt} = r \cdot \frac{V}{m} = 4 \cdot 10^6 \cdot e^{(-7900/T)} \cdot (1-x)$$

En el balance de energía no existe ahora el término de calor transferido :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{-\Delta H}{q \cdot C_p} = \frac{-\Delta H}{q \cdot C_p} \cdot \frac{dx}{dt} \cdot \frac{m}{V}$$

puesto que :

$$r = \frac{m \, dx}{V \cdot dt}$$

Integrando :

$$\Delta T = \frac{-\Delta H}{q \cdot C_p} \cdot \Delta x \cdot \frac{m}{V}$$

o :

$$T = -\Delta H \cdot m \cdot (x - x_0) / (q \cdot C_p \cdot V) + T_0$$

Sustituyendo datos, el balance de energía queda :

$$T = 39.761904 \cdot (x - 0.099043) + 327.93$$

donde 0.099043 y 327.93 (54.77°C) son resultados de la corrida anterior. Los balances se resolvieron mediante la subrutina RUNGE 4; los resultados se muestran más adelante.

3. - Fase de Enfriamiento.

El balance de materia queda igual que en los casos anteriores.

En el balance de energía sólo cambia el calor transferido :

Calor transferido al reactor :

$$= U_A \cdot A \cdot (T_A - T) = -U_A \cdot A \cdot (T - T_A)$$

donde T_A es la temperatura del agua de enfriamiento; se supone que esta temperatura no varía apreciablemente.

El balance de energía completo queda :

$$\frac{dT}{dt} = (-\Delta H \cdot r \cdot V - U_A \cdot A \cdot (T - T_A)) / (q \cdot C_p \cdot V)$$

Haciendo sustituciones queda :

$$\begin{aligned} dT/dt = & 1.5904761 \cdot 10^6 \cdot e^{(-7900/T)} \cdot (1 - x) \\ & - 1.8542857 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 288.16) \end{aligned}$$

Los resultados obtenidos de la solución de estos balances también se muestran más adelante.

Las tabulaciones obtenidas constituyen los perfiles de temperatura y de conversión con respecto al tiempo. El perfil de temperaturas para la fase de reacción se obtiene analíticamente y por lo tanto no se muestra en los listados.

```
ES*RIQJLQ(1).RUNGEMAIN
```

```
 1          1 FORMAT ( )
 2          2 FORMAT (13A6)
 3          EXTERNAL FCAL, REACT, ENFR
 4          DIMENSION TITULO(13)
 5          COMMON YC(2)
 6
 7          C    SIMULACION DE CALENTAMIENTO
 8
 9          READ 2, TITULO
10          READ 1, X1, XFINAL, YC(1), YC(2)
11          CALL RUNGE4 (FCAL, 2, X1, XFINAL, TITULO)
12
13          C    SIMULACION DE REACCION:
14
15          X1 = XFINAL
16          READ 2, TITULO
17          READ 1, XFINAL
18          CALL RUNGE4 (REACT, 1, X1, XFINAL, TITULO)
19
20          C    SIMULACION DE ENFRIAMIENTO:
21
22          X1 = XFINAL
23          READ 2, TITULO
24          READ 1, XFINAL
25          CALL RUNGE4 (ENFR, 2, X1, XFINAL, TITULO)
26          END
```

ES*RI0JL3(1).RUNGE4

```

1      SUBROUTINE RUNGE4 (F, NF, X1, XFINAL, TITULO)
2
3      19 FORMAT ('1',3BX,9A6,/,32X,4(A6,10X))
4      1 FORMAT (27X,4(1PE14.7,2X))
5      DIMENSION X(101), Y(101,4), TITULO(13)
6      COMMON YC(4)
7      REAL K(4, 4)
8      X(1) = X1
9      DO 10 IF=1, NF
10     Y(1, IF) = YC(IF)
11     DX = 0.01*(XFINAL - X(1))
12     PRINT19, TITULO
13     DO 7 N=1, 100
14     PRINT 1, X(N), (Y(N,IF), IF=1, NF)
15     DO 2 IF=1, NF
16     2 YC(IF) = Y(N, IF)
17     DO 3 IF=1, NF
18     3 K(IF, 1) = F(IF, X(N))
19     DX = 0.5*DX
20     DO 6 IK=2, 4
21     IK1 = IK - 1
22     XN = X(N) + DX
23     DO 4 IF=1, NF
24     4 YC(IF) = Y(N, IF) + DX*K(IF, IK1)
25     DO 5 IF=1, NF
26     5 K(IF, IK) = F(IF, XN)
27     6 IF (IK .EQ. 3) DX = 2.0*DX
28     X(N+1) = X(N) + DX
29     DO 7 IF=1, NF
30     7 Y(N+1, IF) = Y(N, IF) + (K(IF, 1) + 2.0*(K(IF, 2) + K(IF, 3)) +
31     -K(IF, 4))*0.166666667*DX
32     PRINT 1, X(101), (Y(101, IF), IF=1, NF)
33     DO 8 IF=1, NF
34     8 YC(IF) = Y(101, IF)
35     RETURN
36     END

```

ES*RI0JLQ(1).FCAL

```
1 FUNCTION FCAL (IF, TIEMPO)
2 COMMON X, T
3 GO TO (1, 2), IF
4 1 FCAL = 4E6*EXP(-7900.0/T)*(1.0-X)
5 RETURN
6 2 FCAL = 1.5904701E6*(1.0-X)*EXP(-7900.0/T)+2.1371428E-4*(393.16-T)
7 RETURN
8 END
```

ES*RIQJLQ(1).REACT

1
2
3
4
5
6

FUNCTION REACT (IF, T)
COMMON X, TA
TA = 39.761904*(X-0.099043)+327.97
REACT = 4E6*EXP(-7900.0/TA)*(1.0-X)
RETURN
END

ES+RIGOLE(1).ENFR

```
1  FUNCTION ENFR (I, T1E7P)  
2  COMPUTE X, T  
3  GO TO (1, 2), I  
4  1 ENFR = 408*EXP(-7900.0/T)*(1.0-X)  
5  RETURN  
6  2 ENFR = 1.590476126*EXP(-7900.0/T)*(1.0-X)-1.0542857E-4*(T-288.16)  
7  RETURN  
8  END
```

SIMULACION DE CALENTAMIENTO

TIEMPO	CONV.	TEMP
0.0000000	0.0000000	2.9316000+02
2.0000000+01	1.6156215-04	2.9358658+02
4.0000000+01	3.2952435-04	2.9401134+02
6.0000000+01	5.0409041-04	2.9443429+02
8.0000000+01	6.8546868-04	2.9485544+02
1.0000000+02	8.7387227-04	2.9527480+02
1.2000000+02	1.0695190-03	2.9569237+02
1.4000000+02	1.2726312-03	2.9610817+02
1.6000000+02	1.4834364-03	2.9652219+02
1.8000000+02	1.7021667-03	2.9693445+02
2.0000000+02	1.9290588-03	2.9734496+02
2.2000000+02	2.1643549-03	2.9775372+02
2.4000000+02	2.4083015-03	2.9816074+02
2.6000000+02	2.6611504-03	2.9856602+02
2.8000000+02	2.9231583-03	2.9896958+02
3.0000000+02	3.1945868-03	2.9937143+02
3.2000000+02	3.4757026-03	2.9977156+02
3.4000000+02	3.7667775-03	3.0016999+02
3.6000000+02	4.0680883-03	3.0056673+02
3.8000000+02	4.3799167-03	3.0096177+02
4.0000000+02	4.7025498-03	3.0135514+02
4.2000000+02	5.0362796-03	3.0174683+02
4.4000000+02	5.3814032-03	3.0213686+02
4.6000000+02	5.7382229-03	3.0252523+02
4.8000000+02	6.1070460-03	3.0291194+02
5.0000000+02	6.4881849-03	3.0329701+02
5.2000000+02	6.8819572-03	3.0368045+02
5.4000000+02	7.2886855-03	3.0406225+02
5.6000000+02	7.7086978-03	3.0444243+02
5.8000000+02	8.1423265-03	3.0482100+02
6.0000000+02	8.5899098-03	3.0519796+02
6.2000000+02	9.0517903-03	3.0557331+02
6.4000000+02	9.5283161-03	3.0594707+02
6.6000000+02	1.0019840-02	3.0631924+02
6.8000000+02	1.0526720-02	3.0668983+02
7.0000000+02	1.1049317-02	3.0705885+02
7.2000000+02	1.1588001-02	3.0742629+02
7.4000000+02	1.2143143-02	3.0779218+02
7.6000000+02	1.2715121-02	3.0815651+02
7.8000000+02	1.3304315-02	3.0851930+02
8.0000000+02	1.3911114-02	3.0888054+02
8.2000000+02	1.4535906-02	3.0924025+02
8.4000000+02	1.5179089-02	3.0959844+02
8.6000000+02	1.5841062-02	3.0995510+02
8.8000000+02	1.6522229-02	3.1031025+02
9.0000000+02	1.7223000-02	3.1066390+02
9.2000000+02	1.7943786-02	3.1101604+02
9.4000000+02	1.8685005-02	3.1136669+02
9.6000000+02	1.9447078-02	3.1171585+02
9.8000000+02	2.0230431-02	3.1206354+02
1.0000000+03	2.1035490-02	3.1240974+02
1.0200000+03	2.1862690-02	3.1275448+02
1.0400000+03	2.2712465-02	3.1309776+02
1.0600000+03	2.3585255-02	3.1343958+02
1.0800000+03	2.4481503-02	3.1377996+02
1.1000000+03	2.5401655-02	3.1411889+02
1.1200000+03	2.6346160-02	3.1445639+02
1.1400000+03	2.7315469-02	3.1479245+02

1.1600000+03	2.8310038-02	3.1512710+02
1.1800000+03	2.9330323-02	3.1546032+02
1.2000000+03	3.0376785-02	3.1579214+02
1.2200000+03	3.1449884-02	3.1612255+02
1.2400000+03	3.2550086-02	3.1645156+02
1.2600000+03	3.3677856-02	3.1677918+02
1.2800000+03	3.4833661-02	3.1710542+02
1.3000000+03	3.6017972-02	3.1743027+02
1.3200000+03	3.7231257-02	3.1775375+02
1.3400000+03	3.8473990-02	3.1807586+02
1.3600000+03	3.9746643-02	3.1839661+02
1.3800000+03	4.1049688-02	3.1871600+02
1.4000000+03	4.2383600-02	3.1903404+02
1.4200000+03	4.3748852-02	3.1935074+02
1.4400000+03	4.5145920-02	3.1966610+02
1.4600000+03	4.6575276-02	3.1998013+02
1.4800000+03	4.8037394-02	3.2029284+02
1.5000000+03	4.9532746-02	3.2060422+02
1.5200000+03	5.1061805-02	3.2091428+02
1.5400000+03	5.2625041-02	3.2122304+02
1.5600000+03	5.4222921-02	3.2153049+02
1.5800000+03	5.5855914-02	3.2183665+02
1.6000000+03	5.7524485-02	3.2214152+02
1.6200000+03	5.9229096-02	3.2244510+02
1.6400000+03	6.0970207-02	3.2274740+02
1.6600000+03	6.2748276-02	3.2304842+02
1.6800000+03	6.4563755-02	3.2334818+02
1.7000000+03	6.6417095-02	3.2364667+02
1.7200000+03	6.8308744-02	3.2394390+02
1.7400000+03	7.0239142-02	3.2423989+02
1.7600000+03	7.2208727-02	3.2453462+02
1.7800000+03	7.4217932-02	3.2482812+02
1.8000000+03	7.6267186-02	3.2512038+02
1.8200000+03	7.8356909-02	3.2541140+02
1.8400000+03	8.0487518-02	3.2570121+02
1.8600000+03	8.2659422-02	3.2598979+02
1.8800000+03	8.4873026-02	3.2627716+02
1.9000000+03	8.7128725-02	3.2656332+02
1.9200000+03	8.9426909-02	3.2684827+02
1.9400000+03	9.1767958-02	3.2713203+02
1.9600000+03	9.4152248-02	3.2741459+02
1.9800000+03	9.6580141-02	3.2769597+02
2.0000000+03	9.9051995-02	3.2797616+02

SIMULACION DE REACCION

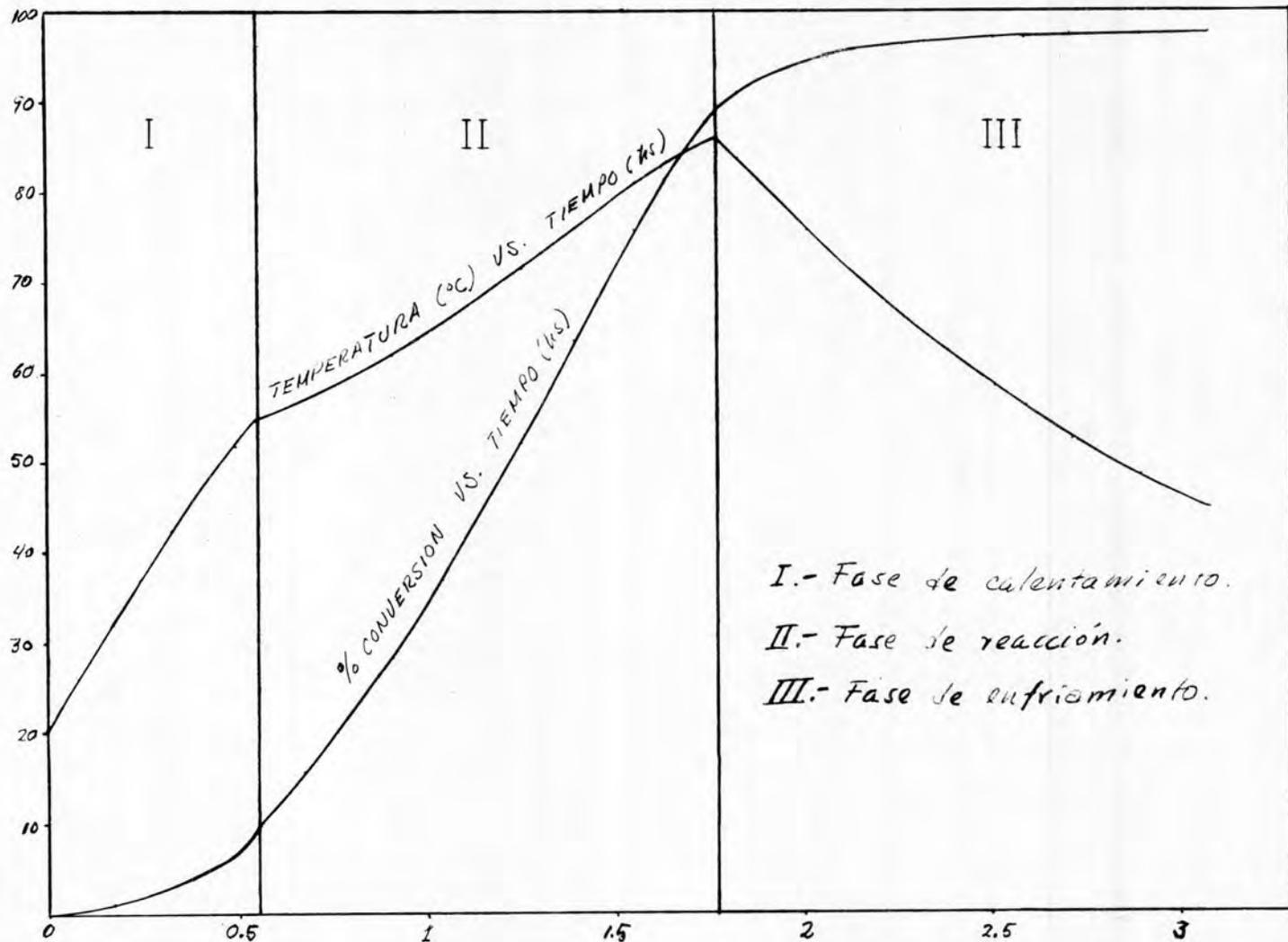
TIEMPO	CONV.
2.0000000+03	9.9051995-02
2.0440000+03	1.0456370-01
2.0880000+03	1.1013063-01
2.1320000+03	1.1575354-01
2.1760000+03	1.2143323-01
2.2200000+03	1.2717046-01
2.2640000+03	1.3296605-01
2.3080000+03	1.3882078-01
2.3520000+03	1.4473545-01
2.3960000+03	1.5071088-01
2.4400000+03	1.5674787-01
2.4840000+03	1.6284723-01
2.5280000+03	1.6900978-01
2.5720000+03	1.7523634-01
2.6160000+03	1.8152770-01
2.6600000+03	1.8788470-01
2.7040000+03	1.9430813-01
2.7480000+03	2.0079880-01
2.7920000+03	2.0735752-01
2.8360000+03	2.1398506-01
2.8800000+03	2.2068221-01
2.9240000+03	2.2744974-01
2.9680000+03	2.3428840-01
3.0120000+03	2.4119893-01
3.0560000+03	2.4818205-01
3.1000000+03	2.5523847-01
3.1440000+03	2.6236884-01
3.1880000+03	2.6957383-01
3.2320000+03	2.7685403-01
3.2760000+03	2.8421004-01
3.3200000+03	2.9164239-01
3.3640000+03	2.9915157-01
3.4080000+03	3.0673805-01
3.4520000+03	3.1440221-01
3.4960000+03	3.2214439-01
3.5400000+03	3.2996487-01
3.5840000+03	3.3786386-01
3.6280000+03	3.4584148-01
3.6720000+03	3.5389779-01
3.7160000+03	3.6203275-01
3.7600000+03	3.7024621-01
3.8040000+03	3.7853795-01
3.8480000+03	3.8690761-01
3.8920000+03	3.9535473-01
3.9360000+03	4.0387869-01
3.9800000+03	4.1247876-01
4.0240000+03	4.2115404-01
4.0680000+03	4.2990351-01
4.1120000+03	4.3872593-01
4.1560000+03	4.4761992-01
4.2000000+03	4.5658388-01
4.2440000+03	4.6561605-01
4.2880000+03	4.7471441-01
4.3320000+03	4.8387676-01
4.3760000+03	4.9310064-01
4.4200000+03	5.0238335-01
4.4640000+03	5.1172194-01
4.5080000+03	5.2111319-01

4.5520000+03	5.3055359-01
4.5960000+03	5.4003938-01
4.6400000+03	5.4956648-01
4.6840000+03	5.5913052-01
4.7280000+03	5.6872680-01
4.7720000+03	5.7835034-01
4.8160000+03	5.8799583-01
4.8600000+03	5.9765765-01
4.9040000+03	6.0732985-01
4.9480000+03	6.1700619-01
4.9920000+03	6.2668011-01
5.0360000+03	6.3634474-01
5.0800000+03	6.4599295-01
5.1240000+03	6.5561732-01
5.1680000+03	6.6521018-01
5.2120000+03	6.7476363-01
5.2560000+03	6.8426955-01
5.3000000+03	6.9371965-01
5.3440000+03	7.0310548-01
5.3880000+03	7.1241848-01
5.4320000+03	7.2165001-01
5.4760000+03	7.3079140-01
5.5200000+03	7.3983397-01
5.5640000+03	7.4876912-01
5.6080000+03	7.5758832-01
5.6520000+03	7.6628320-01
5.6960000+03	7.7484560-01
5.7400000+03	7.8326759-01
5.7840000+03	7.9154156-01
5.8280000+03	7.9966021-01
5.8720000+03	8.0761667-01
5.9160000+03	8.1540447-01
5.9600000+03	8.2301763-01
6.0040000+03	8.3045070-01
6.0480000+03	8.3769874-01
6.0920000+03	8.4475738-01
6.1360000+03	8.5162286-01
6.1800000+03	8.5829204-01
6.2240000+03	8.6476234-01
6.2680000+03	8.7103187-01
6.3120000+03	8.7709932-01
6.3560000+03	8.8296399-01
6.4000000+03	8.8862581-01

SIMULACION DE ENFRIAMIENTO

TIEMPO	CONV.	TEMP
6.4000000+03	8.8862581-01	3.5936535+02
6.4500000+03	8.9465031-01	3.5871061+02
6.5000000+03	9.0013130-01	3.5806170+02
6.5500000+03	9.0512953-01	3.5741859+02
6.6000000+03	9.0969780-01	3.5678124+02
6.6500000+03	9.1388216-01	3.5614962+02
6.7000000+03	9.1772284-01	3.5552370+02
6.7500000+03	9.2125513-01	3.5490343+02
6.8000000+03	9.2451004-01	3.5428877+02
6.8500000+03	9.2751491-01	3.5367968+02
6.9000000+03	9.3029388-01	3.5307613+02
6.9500000+03	9.3286834-01	3.5247807+02
7.0000000+03	9.3525727-01	3.5188545+02
7.0500000+03	9.3747757-01	3.5129823+02
7.1000000+03	9.3954428-01	3.5071638+02
7.1500000+03	9.4147088-01	3.5013984+02
7.2000000+03	9.4326942-01	3.4956856+02
7.2500000+03	9.4495071-01	3.4900251+02
7.3000000+03	9.4652446-01	3.4844165+02
7.3500000+03	9.4799945-01	3.4788592+02
7.4000000+03	9.4938356-01	3.4733529+02
7.4500000+03	9.5068396-01	3.4678970+02
7.5000000+03	9.5190710-01	3.4624911+02
7.5500000+03	9.5305885-01	3.4571349+02
7.6000000+03	9.5414454-01	3.4518279+02
7.6500000+03	9.5516902-01	3.4465696+02
7.7000000+03	9.5613673-01	3.4413595+02
7.7500000+03	9.5705169-01	3.4361974+02
7.8000000+03	9.5791759-01	3.4310826+02
7.8500000+03	9.5873782-01	3.4260150+02
7.9000000+03	9.5951547-01	3.4209039+02
7.9500000+03	9.6025338-01	3.4160190+02
8.0000000+03	9.6095417-01	3.4110899+02
8.0500000+03	9.6162023-01	3.4062061+02
8.1000000+03	9.6225380-01	3.4013673+02
8.1500000+03	9.6285691-01	3.3965730+02
8.2000000+03	9.6343146-01	3.3918228+02
8.2500000+03	9.6397918-01	3.3871163+02
8.3000000+03	9.6450169-01	3.3824532+02
8.3500000+03	9.6500050-01	3.3778330+02
8.4000000+03	9.6547699-01	3.3732554+02
8.4500000+03	9.6593245-01	3.3687199+02
8.5000000+03	9.6636809-01	3.3642263+02
8.5500000+03	9.6678501-01	3.3597740+02
8.6000000+03	9.6718428-01	3.3553627+02
8.6500000+03	9.6756684-01	3.3509921+02
8.7000000+03	9.6793361-01	3.3466617+02
8.7500000+03	9.6828543-01	3.3423713+02
8.8000000+03	9.6862310-01	3.3381203+02
8.8500000+03	9.6894735-01	3.3339086+02
8.9000000+03	9.6925887-01	3.3297357+02
8.9500000+03	9.6955832-01	3.3256013+02
9.0000000+03	9.6984630-01	3.3215049+02
9.0500000+03	9.7012339-01	3.3174464+02
9.1000000+03	9.7039012-01	3.3134252+02
9.1500000+03	9.7064699-01	3.3094411+02
9.2000000+03	9.7089449-01	3.3054937+02
9.2500000+03	9.7113305-01	3.3015827+02

9.3000000+03	9.7136310-01	3.2977078+02
9.3500000+03	9.7158504-01	3.2938686+02
9.4000000+03	9.7179924-01	3.2900648+02
9.4500000+03	9.7200605-01	3.2862961+02
9.5000000+03	9.7220581-01	3.2825621+02
9.5500000+03	9.7239882-01	3.2788626+02
9.6000000+03	9.7258540-01	3.2751971+02
9.6500000+03	9.7276582-01	3.2715656+02
9.7000000+03	9.7294035-01	3.2679674+02
9.7500000+03	9.7310924-01	3.2644025+02
9.8000000+03	9.7327273-01	3.2608704+02
9.8500000+03	9.7343104-01	3.2573709+02
9.9000000+03	9.7358441-01	3.2539037+02
9.9500000+03	9.7373302-01	3.2504685+02
1.0000000+04	9.7387708-01	3.2470649+02
1.0050000+04	9.7401676-01	3.2436928+02
1.0100000+04	9.7415225-01	3.2403517+02
1.0150000+04	9.7428371-01	3.2370415+02
1.0200000+04	9.7441130-01	3.2337618+02
1.0250000+04	9.7453517-01	3.2305124+02
1.0300000+04	9.7465547-01	3.2272929+02
1.0350000+04	9.7477233-01	3.2241031+02
1.0400000+04	9.7488589-01	3.2209428+02
1.0450000+04	9.7499626-01	3.2178116+02
1.0500000+04	9.7510357-01	3.2147093+02
1.0550000+04	9.7520793-01	3.2116356+02
1.0600000+04	9.7530945-01	3.2085902+02
1.0650000+04	9.7540824-01	3.2055730+02
1.0700000+04	9.7550439-01	3.2025836+02
1.0750000+04	9.7559800-01	3.1996217+02
1.0800000+04	9.7568916-01	3.1966872+02
1.0850000+04	9.7577795-01	3.1937798+02
1.0900000+04	9.7586446-01	3.1908992+02
1.0950000+04	9.7594877-01	3.1880451+02
1.1000000+04	9.7603095-01	3.1852174+02
1.1050000+04	9.7611108-01	3.1824158+02
1.1100000+04	9.7618923-01	3.1796400+02
1.1150000+04	9.7626546-01	3.1768898+02
1.1200000+04	9.7633984-01	3.1741650+02
1.1250000+04	9.7641242-01	3.1714654+02
1.1300000+04	9.7648328-01	3.1687906+02
1.1350000+04	9.7655246-01	3.1661406+02
1.1400000+04	9.7662001-01	3.1635149+02



I.- Fase de calentamiento.
 II.- Fase de reacción.
 III.- Fase de enfriamiento.

BIBLIOGRAFIA POR CAPITULOS

En las páginas que siguen aparece la bibliografía a la que se hizo referencia en el texto, separada por capítulos.

Las citadas a lo largo de la tesis se complementan con otras sobre el mismo tema.

C A P I T U L O I.

1. - BURROUGHS; Fortran Reference Manual (1972).
2. - HODGE, B.; MANTEY, J.; "Computer Refresher"; Chemical Engineering, Partes : 1 : Vol. 74, Sept. 25, 180-184 (1967); 2 : Vol. 74, Oct. 23, 167-171 (1967); 3 : Vol. 74, Nov. 20, 141-146 (1967); 4 : Vol. 74, Dic. 18, 110-113 (1967); 5 : Vol. 75, Ene. 1, 79-83 (1968); 6 : Vol. 74, Feb. 26, 169-172 (1968); 7 : Vol. 75, Mar. 11, 187-192 (1968); 8 : Vol. 75, Abr. 22, 185-188 (1968); 9 : Vol. 75, May. 20, 165-167 (1968); 10 : Vol. 75, Jun. 17, 271-276 (1968); 11 : Vol. 75, Jul. 29, 151-156 (1968); 12 : Vol. 75, Sept. 23, 221-226 (1968); 13 : Vol. 75, Oct. 21, 151-154 (1968); 14 : Vol. 75, Dic. 2, 127-132 (1968); 15 : Vol. 75, Dic. 16, 107-112 (1968).

C A P I T U L O II.

1. - BENEDICT, M.; WEBB, G. B.; RUBIN, J.; Chemical Physics, 8, 334 (1940).
2. - STARLING, K. E.; Hydrocarbon Processing, 50, 3, 101 (1971).
3. - STARLING, K. E.; HAN, M. S.; Hydrocarbon Processing, 51, 5, 129 (1972).
4. - LAPINA, R. P.; "Predict Water Thermo Properties"; Hydrocarbon Processing, 54, 2, 115 (1975).
5. - JOHNSON, D. W.; COLVER, C. P.; Hydrocarbon Processing 48, 1, 127 (1969).

6. - JOHNSON, D W. & COLVER, C. P.; Hydrocarbon Processing, 48, 1, 127 (1969).
7. - STARLING, K. E.; "Thermo data refined for LPG", Partes 2 y 3, Hydrocarbon Processing, 50, 4, 139-145 (1971).
8. - STARLING, K. E.; "Thermo data refined for LPG", Partes 4 y 5, Hydrocarbon Processing, 50, 6, 116-122 (1971).
9. - STARLING, K. E. & HAN, M. S., "Thermo data refined for LPG", Parte 15, Hydrocarbon Processing, 51, 6, 107-115 (1972).

C A P I T U L O III

1. - REID, R. C. & SHERWOOD, T. K.; "Propiedades de los gases y líquidos, traducción a la segunda edición en inglés, UTEHA (1968).
2. - GAMBILL, W. R.; "Best methods for Prandtl number", Chemical Engineering, 65, Ago. 25, 121-124 (1958).
3. - GAMBILL, W. R.; "How T & P change gas viscosity", Chemical Engineering, 65, Oct. 20, 157-162 (1958).
4. - GAMBILL, W. R.; "To get viscosity for a gas mixture", Chemical Engineering, 65, Nov. 17, 157-160 (1958).
5. - GAMBILL, W. R.; "How to calculate liquid viscosity", Chemical Engineering, 66, Ene. 12, 127-130 (1959).
6. - GAMBILL, W. R.; "How P & T change liquid viscosity", Chemical Engineering, 66, Feb. 9, 123-126 (1959).
7. - GAMBILL, W. R.; "How to estimate mixture viscosities", Chemical Engineering, 66, Mar. 9, 151-152 (1959).

8. - JOHNSON, D. W. & COLVER, S. P.; "Mixture properties by computer", Parte 3: "Viscosity, Thermal Conductivity and Difusivity", Hydrocarbon Processing, 48, 110-122 (1969).

C A P I T U L O I V

1. - YUAN, S. C. & MOK, Y. I.; "New look at heat capacity prediction", Hydrocarbon Processing, 47, 3, 133 (1968).
2. - YUAN, S. C. & MOK, Y. I.; "New look at heat capacity prediction", Hydrocarbon Processing, 47, 7, 153 (1968).
3. - THINH, T. P.; DURAN, J. L.; RAMALHO, R. S. & KALIAGUINE, S.; "Equations improve Cp predictions", Hydrocarbon Processing, 50, 1, 98 (1971).
4. - THINH, T. P.; DURAN, J. L.; RAMALHO, R. S. & KALIAGUINE, S.; "Predict heat capacity more accurately", 55, 8, 153 (1976).
5. - TOULOUKIAN & MAKITA; "Specific heat", IFI/PLENUM, New York-Washington (1970).
6. - LEWIS & RANDAL; "Thermodynamics", 2a. edición, McGraw Hill-Kogakusha (1961), (Revisión de Pitzer & Brewer).
7. - PERRY, R. H. & CHILTON, C. H.; "Chemical Engineers' Handbook", McGraw Hill, 5a. edición (1973).
8. - LYMAN, T. J. & DANNER, R. P.; "Correlation of liquid heat capacities with a four-parameter corresponding states method", A.I. C. E. Journal, 22, 4, 759 (1976).

C A P I T U L O V

1. - CANFIELD, F. B.; "Estimate K-values with the computer", *Hydrocarbon Processing*, 50, 4, 137 (1971).
2. - HENLEY, E. J.; "Material and energy balance computations", John Wiley & Sons, Inc., New York (1969).
3. - CHAO, K. C. & SEADER, J. D.; "A general correlation of vapor-liquid equilibria in hydrocarbon mixtures", *A.I.Ch.E. Journal*, 7, 4, 598 (1961).
4. - LEE, B. & EDMISTER, W.; "A generalized method for predicting vapor-liquid equilibrium", *A.I.Ch.E. Journal*, 17, 6, 1412 (1971).
5. - SEBASTIAN, E.; "Method speeds up calculation of phase composition", *Chemical Engineering*, 75, Mar. 11, 218 (1968).
6. - ADLER, S. B.; OZKARDESH, H. & SHREINER, W.; "These equations predict equilibria", *Hydrocarbon Processing*, 47, 4, 145, (1968).
7. - SOAVE, G.; "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state", *Chemical Engineering Science*, 27, 6, 1197 (1972).

C A P I T U L O VI

1. - REID, R. C. & SHERWOOD, T. K.; "Propiedades de los gases y líquidos", UTEHA, primera edición en español (1968).
2. - TOULOUKIAN; "Thermal conductivity", IFI/PLENUM, New York-Washington (1970).

3. - JOHNSON, D W.; COLVER, S. Ph.; "Mixture properties by computer", Parte 3, Hydrocarbon Processing, 48, 3, 113 (1969).
4. - NARASIMHAN, K. S.; SWAMY, K. M. & NARAYANA, K. L.; "New correlation for thermal conductivity", Chemical Engineering, 82, Abr. 14, 83 (1975).
5. - GALLANT, R. W.; "Thermal conductivity of C₁ to C₄ hydrocarbon"; Hydrocarbon Processing, 45, 12, 113 (1966).

C A P I T U L O VII

1. - REID, R. C. & SHERWOOD, T. K.; "Propiedades de los gases y líquidos", UTEHA, primera edición en español (1968).
2. - OTHMER, D. F.; MAURER, P. W.; MOLINARY, S. J. & KOWALSKI, R. C; "Correlating vapor pressures and other physical properties", Industrial and Engineering Chemistry, 49, 1, 125 (1957).
3. - OTHMER, D. F.; "Correlating vapor pressure and latent heat ", Industrial and Engineering Chemistry, 34, 9, 1072 (1942).
4. - DREISBACH, R. R. & SPENCER, R. S.; "Infinite points of Cox chart families and dt/dP values at any pressure", Industrial and Engineering Chemistry, 41, 1, 176 (1949).
5. - STITZELL, J. A.; "Selecting the best vapor-pressure equation by computer", Chemical Engineering, 79, Mar. 20, 136 (1972).

C A P I T U L O VIII

1. - TORAL, M. T.; "Fisicoquímica de superficies y sistemas disper

sos", Ediciones URMO (1973).

2. - REID, R. C. & SHERWOOD, T. K.; "Propiedades de los gases y líquidos", UTEHA, primera edición en español (1968).
3. - BROCK, J. R. & BIRD, R. B.: A.I.Ch.E. Journal, 1, 174 (1955).
4. - PERRY, R. H. & CHILTON, C. H.; "Chemical Engineers' Handbook", McGraw Hill Book Company, quinta edición (1973).

C A P I T U L O IX

1. - HOUGEN, O. A.; WATSON, K.M. & RAGATZ, R.A.; "Chemical process principles", Parte II, John Wiley & Sons, Inc., New York (1965).
2. - STARLING, K. E. & HAN, M. S.; "Thermodata refined for LPG", Parte XV, Hydrocarbon Processing, 51, 6, 107-115 (1972).
3. - KESLER, M. G.; LEE, B. I.; BENZING, D. W. & CRUZ, A; "Method improves convergence pressure predictions", Hydrocarbon Processing, 56, 6, 177-179 (1977).
4. - REID, R. C. & SHERWOOD, T. K.; "Propiedades de los gases y líquidos", UTEHA, primera edición en español (1968).
5. - PERRY, R. H. & CHILTON, C. H.; "Chemical Engineers' Handbook", McGraw Hill Book Company, quinta edición (1973).
6. - THINH, T. P.; DURAN, J. L.; RAMALHO, R. S. & KALIAQUINE, S.; Hydrocarbon Processing, 50, 1, 98 (1971).
7. - TOULOUKIAN & MAKITA; "Specific heat", IFI/PLENUM, New York-Washington (1970).

C A P I T U L O X

1. - TREYBAL, R. E.; "Mass transfer operations", McGraw Hill Kogakusha, segunda edición (1972).
2. - HOUGEN, O. A.; WATSON, K. M. & RGATZ, R. A.; "Chemical process principles", Parte I, segunda edición, John Wiley & Sons, Inc. New York (1965).

C A P I T U L O XI

1. - "Flow of fluids through valves, fittings and pipe"; Technical paper No. 410, Crane Co. (1969).
2. - EDMISTER, W. C.; "Applied hydrocarbon thermodynamics"; Petroleum Refiner, 38, 7, 161-168 (1959).
3. - MOODY, L. F.; "Friction factor for pipe flow"; Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, 66, 11, 671-678 (Nov. 1944).
4. - DEGANCE, A. E. & ATHERTON, R. W.; "Chemical engineering aspects of two-phase flow", Parte IV, Chemical Engineering, 77, Jul. 13, 95-103 (1970).

C A P I T U L O XII

1. - DUKLER, A. E.; WICKS, M. & CLEVELAND, R. G.; A.I.Ch. E. Journal, 10, 1, 38-51 (1964).
2. - BAKER, O.; Oil and Gas J. (Jun. 26, 1954).
3. - BANKOFF, S. G.; Trans. Am. Soc. Mech. Engrs., 82, 265 (1960).

4. - CHENOWETH, J. M. & MARTIN, M. W.; *Petrol. Refiner*, 34, 151 (1955).
5. - LOCKHART, R. W. & MARTINELLI, R. C.; *Chem. Eng. Progr.* 45, 39 (1949).
6. - YAGI, S.; *Chem. Eng. (Japan)*, 18, 2 (1954).
7. - HOOGENDOORN, C. J.; *Chem. Eng. Sci.*, 9, 205 (1959).
8. - HUGHMARK, G. A.; *Chem. Eng. Progr.*, 58, 4, 62 (1962).
9. - DEGANCE, A. E. & ATHERTON, R. W.; *Chem. Eng.*, 77, Jul. 13, 95-103 (1970).
10. - DEGANCE, A. E. & ATHERTON, R. W.; *Chem. Eng.*, 77, Nov. 2, 101-108 (1970).
11. - KERN, S. Q.; "Process heat transfer", McGraw Hill Book Co. Inc. (1950).

C A P I T U L O XIII

1. - "Elliott multistage centrifugal compressors", Bulletin P-11A, Elliott Company, Jeannette, Penn. (1966).
2. - LUDWIG, E. E.; "Applied process design for chemical and petrochemical plants", Vol. III, Gulf Publishing Company, Houston, - Texas (1965).
3. - EDMISTER, W. C.; "Gas compressor design", *Chemical Engineering Progress*, 45, 7, 421 (1949).
4. - EDMISTER, W. C.; "Compressor and expander design", *Chemical Engineering Progress*, 47, 4, 191 (1951).

5. - CHODNOWSKY, N. M.; "Centrifugal compressors for high-pressure service", Chemical Engineering, 75, Dic. 2, 110 (1968).

C A P I T U L O XIV

1. - KERN, D. Q.; "Procesos de transferencia de calor", C.E.C.S.A., octava impresión (1974).
2. - LUDWIG, E. E.; "Applied process design for chemical and petrochemical plants", Vol. III, Gulf Publishing Company, Houston, Texas (1965).
3. - FISHER, F. K.; "Mean temperature difference correction in multipas exchangers", Industrial and Engineering Chemistry, 30, 4, - 377 (1938).
4. - FANARITIS, J. P. & BEVEVINO, J. W.; "How to select the optimum shell-and-tube heat exchanger", Chemical Engineering, 83, Jul. 5, 62 (1976).
5. - BUTTERWOR, D. & COUSINS, L. B.; "Use of computer programs in heat-exchanger design", Chemical Engineering, 83, Jul. 5, 72, (1976).

C A P I T U L O XV

1. - WANG, J. C. & HENKE, G. E.; "Tridiagonal matrix for distillation", Hydrocarbon Processing, 45, 8, 155 (1966).
2. - HOUGEN, O. A.; WATSON, K. M. & RAGATZ, R. A.; "Chemical process principles", Parte II, John Wiley & Sons, Inc., New York (1965).

3. - BURNINGHAM, D. W. & OTTO, F. D.; "Which computer design for absorber ?"; Hydrocarbon Processing, 46, 10, 163 (1967).
4. - TOMICH, J. F.; "A new simulation method for equilibrium stage processes", A.I.Ch.E. Journal, 16, 2, 229 (1970).
5. - ECKHART, R. A. & ROSE, A.; "New method for distillation prediction", Hydrocarbon Processing, 47, 5, 165 (1968).

C A P I T U L O XVI

1. - LUDWIG, E. E.; "Applied process design for chemical and petrochemical plants", Vol. I, Gulf Publishing Company, Houston, Texas (1964).

C A P I T U L O XVII

1. - CARNAHAN, B.; LUTHER, H. A. & WILKES, J. O.; "Applied numerical methods", John Wiley & Sons, Inc., New York (1969).

C A P I T U L O XVIII

1. - KUE, S. S.; "Numerical methods and computers", Addison-Wesley (1965).

C A P I T U L O XIX

1. - KUE, S. S.; "Numerical methods and computers", Addison-Wesley (1965).

C A P I T U L O XX

1. - KUE, S. S.; "Numerical methods and computers", Addison-Wesley (1965).

C A P I T U L O XXI

1. - KUE, S. S.; "Numerical methods and computers", Addison-Wesley (1965).
2. - ZANKER, A.; "Developing empirical equations", Chemical Engineering, 83, Ene. 19, 101 (1976).
3. - JOHNSON, E. E.; "Curve fitting easily done with hyperbolic equation", Chemical Engineering, 76, Ago. 11, 122 (1969).

C A P I T U L O XXII

1. - KUE, S. S.; "Numerical methods and computers", Addison-Wesley (1965).
2. - CARNAHAN, B.; LUTHER, H. A. & WILKES, J. O.; "Applied numerical methods", John Wiley & Sons, Inc., New York (1969).

C A P I T U L O XXIII

1. - CARNAHAN, B.; LUTHER, H. A. & WILKES, J. O.; "Applied numerical methods", John Wiley & Sons, Inc., New York (1969).

C A P I T U L O XXIV

1. - KUE, S. S.; "Numerical methods and computers", Addison-Wesley (1965).

CONCLUSION

C O N C L U S I O N

En los capítulos precedentes se han discutido métodos y programas para varios cálculos importantes de Ingeniería Química, cuyo fin fue ilustrar el empleo de la computadora en esta profesión. Se abarcaron las propiedades físicas más comunes y básicas, tratándose algunos problemas típicos en la Sección II; la Sección III puede entenderse como un apéndice en donde se analizan los métodos numéricos empleados a lo largo de la tesis.

Tal como se expuso en la introducción, los programas están realizados de forma tal, que su entendimiento no sea difícil. La tesis se dividió en veinticuatro capítulos para poder ser empleada como un manual, estudiándose específicamente el tema que se desee tratar. En la mayoría de los casos, se tiene que hacer referencia a otra parte ya que en realidad las propiedades físicas tienen una relación estrecha entre ellas mismas y el cálculo de equipo no se puede efectuar sin estas propiedades y sin métodos numéricos.

En las partes correspondientes a los programas, se pretendió dar un enfoque para su aplicación dentro de una facultad, es decir, hacer una explicación tal, que un estudiante pueda entenderla y aplicarla. Por este motivo, se habla de tarjetas para dar datos y no se tratan otras unidades de entrada y de salida que no sean respectivamente la lectora de tarjetas y la impresora de papel. Asimismo, en todos los pro

gramas completos, se explica la entrada de datos dando las especificaciones de campo y en las subrutinas se detalla la lista de argumentos.

Se procuró poner de una manera fácil y concisa los diferentes métodos y se espera que esta tesis cumpla con sus objetivos que son, antes que nada, dar a los estudiantes de Ingeniería Química un manual de métodos y programas que les sean útiles en el transcurso de su carrera y de esta manera, motivarlos para que estudien algún lenguaje de computadora y aprendan a emplearla dentro de la profesión que escogieron, así como proveer un manual que sea útil también a nivel profesional.

No debemos terminar este trabajo, sin hacer presente nuestro más profundo y sincero agradecimiento, a todas las personas que estuvieron con nosotros y que de una manera u otra nos ayudaron a elaborarlo.